

Школа Инженерная школа ядерных технологий  
 Направление подготовки 03.03.02 «Физика»  
 Отделение школы (НОЦ) Экспериментальной физики

### БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

| Тема работы  |
|--|
| <b>Миграция дефектов в многослойной структуре Zr-Nb при ионной имплантации</b> |

УДК 539.21:539.1:620.19

Студент

| Группа | ФИО                      | Подпись | Дата |
|--------|--------------------------|---------|------|
| 0Б51   | Очиров Евгений Эрдэмович |         |      |

Руководитель ВКР

| Должность             | ФИО                      | Ученая степень,<br>звание | Подпись | Дата |
|-----------------------|--------------------------|---------------------------|---------|------|
| Профессор ОЭФ<br>ИЯТШ | Лидер Андрей<br>Маркович | д.т.н., доцент            |         |      |

Консультант

| Должность                            | ФИО                               | Ученая степень,<br>звание | Подпись | Дата |
|--------------------------------------|-----------------------------------|---------------------------|---------|------|
| Старший<br>преподаватель ОЭФ<br>ИЯТШ | Чистякова Надежда<br>Владимировна | к.ф-м.н                   |         |      |

### КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

| Должность        | ФИО                             | Ученая степень,<br>звание | Подпись | Дата |
|------------------|---------------------------------|---------------------------|---------|------|
| Доцент ОСГН ШБИП | Конотопский<br>Владимир Юрьевич | к.э.н.<br>доцент          |         |      |

По разделу «Социальная ответственность»

| Должность                            | ФИО                              | Ученая степень,<br>звание | Подпись | Дата |
|--------------------------------------|----------------------------------|---------------------------|---------|------|
| Старший<br>преподаватель ООД<br>ШБИП | Скачкова Лариса<br>Александровна |                           |         |      |

### ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

| Руководитель ООП                  | ФИО                      | Ученая степень,<br>звание | Подпись | Дата |
|-----------------------------------|--------------------------|---------------------------|---------|------|
| Руководитель<br>отделения ЭФ ИЯТШ | Лидер Андрей<br>Маркович | д.т.н., доцент            |         |      |

## Запланированные результаты обучения по программе

| Код<br>результата                       | Результат обучения<br>(выпускник способен)  | Требования<br>ФГОС,<br>критериев и/или<br>заинтересованных<br>сторон |
|---|---|--|
| <i>Общекультурные компетенции</i>       |   |  |
| <b>Р1</b>                               | Использовать основные этапы и закономерности исторического развития общества, основы философских, экономических, правовых знаний для формирования мировоззренческой, гражданской позиций и использования в различных сферах жизнедеятельности   | Требования<br>ФГОСЗ+<br><br>(ОК-1, ОК-2,<br>ОК-3, ОК-4)              |
| <b>Р2</b>                               | К самоорганизации и самообразованию, работать в коллективе, к коммуникации в устной и письменной формах, в том числе на иностранном языке, толерантно воспринимать социальные, этические и культурные различия, использовать методы и средства физической культуры, приёмы первой помощи и методы защиты в условиях ЧС.   | Требования<br>ФГОСЗ+<br><br>(ОК-5, ОК-6, ОК-7,<br>ОК-8, ОК-9)        |
| <i>Общепрофессиональные компетенции</i> |   |  |
| <b>Р3</b>                               | Использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, современные концепции и ограничения естественных наук, использовать фундаментальные знания разделов общей и теоретической физики, математики для создания моделей и решения типовых профессиональных задач, в том числе с использованием знаний профессионального иностранного языка. | Требования<br>ФГОСЗ+<br><br>(ОПК-1, ОПК-2,<br>ОПК-3, ОПК-7)          |
| <b>Р4</b>                               | Понимать сущность и значение информации, соблюдать основные требования информационной безопасности, использовать методы, способы, средства получения и хранения информации, решать стандартные задачи на основе информационной и библиографической культуры.  | Требования<br>ФГОСЗ+<br><br>(ОПК-4, ОПК-5,<br>ОПК-6)                 |
| <b>Р5</b>                               | Получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах, критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности.  | Требования<br>ФГОСЗ+<br><br>(ОПК-8, ОПК-9)                           |

| <i>Профессиональные компетенции</i> |  |   |
|-------------------------------------|--|---|
| <b>Р<br/>6</b>                      | <u>Научно-исследовательская деятельность</u><br>Проводить научные теоретические и экспериментальные исследования в областях: материаловедения, атомной и ядерной физики, водородной энергетики, физики плазмы с помощью современной приборной базы с использованием специализированных знаний физики и освоенных профильных дисциплин.                               | Требования ФГОСЗ+<br>(ПК-1, ПК-2)       |
| <b>Р<br/>7</b>                      | <u>Научно-инновационная деятельность</u><br>Применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований, а также профессиональные знания и умения в результате освоения профильных дисциплин для проведения физических исследований в инновационных областях науки, используя современные методы обработки, анализа и синтеза информации. | Требования ФГОСЗ+<br>(ПК-3, ПК-4, ПК-5) |
| <b>Р<br/>8</b>                      | <u>Организационно-управленческая</u><br>Использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований, участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме, понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования  | Требования ФГОСЗ+<br>(ПК-6, ПК-7, ПК-8) |
| <b>Р<br/>9</b>                      | <u>Педагогически-просветительская</u><br>Проектировать, организовывать, анализировать педагогическую деятельность, владеть последовательностью изложения материала с использованием междисциплинарных связей физики с другими дисциплинами, участвовать в информационно-образовательных мероприятиях по пропаганде и распространению научных знаний                  | Требования ФГОСЗ+<br>(ПК-9)             |

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа ядерных технологий  
Направление подготовки 03.03.02 «Физика»  
Отделение школы (НОЦ) Экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:  
Руководитель ООП  
\_\_\_\_\_ Лидер А.М.  
(Подпись)      (Дата)      (Ф.И.О.)

### ЗАДАНИЕ на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

|                     |
|---------------------|
| Бакалаврской работы |
|---------------------|

Студенту:

| Группа | ФИО                        |
|--------|----------------------------|
| ОБ51   | Очирову Евгению Эрдэмовичу |

Тема работы:

|  |  |
|--|--|
| <b>Миграции дефектов в многослойной структуре Zr-Nb при ионной имплантации</b> |  |
| Утверждена приказом директора (дата, номер)                                    |  |

|  |  |
|--|--|
| Срок сдачи студентом выполненной работы: |  |
|--|--|

#### ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

|   |  |
|---|--|
| <p><b>Исходные данные к работе</b></p> <p><i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p> | <p>Объектом исследования является молекулярно-динамическая модель многослойная структура Zr-Nb</p> |
|---|--|

|  |   |
|--|---|
| <p><b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b></p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p> | <ul style="list-style-type: none"> <li>– Аналитический обзор литературы по методам исследования межфазных структур в многослойных материалах</li> <li>– Изучение метода молекулярной динамики и программного обеспечения LAMMPS</li> <li>– Проведение моделирования: построение структуры Zr-Nb и реализация алгоритма для моделирования миграции дефектов</li> <li>– Анализ полученных результатов</li> <li>– Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение</li> <li>– Социальная ответственность</li> </ul> |
| <p><b>Перечень графического материала</b></p> <p><i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>   |   |

**Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы**

| Раздел  | Консультант                                  |
|---|--|
| Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение | Конотопский В. Ю. Доцент ОСГН ШБИП           |
| Социальная ответственность                                      | Скачкова Л.А. Старший преподаватель ООД ШБИП |

**Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:**

|  |  |
|--|--|
|  |  |
|  |  |
| Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику |  |

**Задание выдал консультант:**

| Должность                      | ФИО                            | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|--------------------------------|--------------------------------|------------------------|---------|------|
| Старший преподаватель ОЭФ ИЯТШ | Чистякова Надежда Владимировна | к.ф-м.н                |         |      |

**Задание принял к исполнению студент:**

| Группа | ФИО                      | Подпись | Дата |
|--------|--------------------------|---------|------|
| ОБ51   | Очиров Евгений Эрдэмович |         |      |

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА**  
**«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И**  
**РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

| Группа | ФИО                        |
|--------|----------------------------|
| 0Б51   | Очирову Евгению Эрдэмовичу |

| Школа               | ИЯТШ     | Отделение школы (НОЦ)     | Экспериментальной Физики |
|---------------------|----------|---------------------------|--------------------------|
| Уровень образования | Бакалавр | Направление/специальность | 03.03.02 Физика          |

**Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:**

|  |                                 |
|--|---------------------------------|
| 1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих | Принять по действующим ценам    |
| 2. Нормы и нормативы расходования ресурсов   | -                               |
| 3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования                                  | Ставки НДС и социального налога |

**Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:**

|  |           |
|--|-----------|
| 1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения | -         |
| 2. Планирование и формирование бюджета научных исследований  | Выполнить |
| 3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования        | Выполнить |

**Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):**

|  |
|--|
| 1. Оценка конкурентоспособности технических решений                          |
| 2. Матрица SWOT  |
| 3. Альтернативы проведения НИ  |
| 4. График проведения и бюджет НИ   |
| 5. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ - выполнить |

|  |  |
|--|--|
| Дата выдачи задания для раздела по линейному графику |  |
|--|--|

**Задание выдал консультант:**

| Должность        | ФИО                          | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|------------------|------------------------------|------------------------|---------|------|
| Доцент ОСГН ШБИП | Конотопский Владимир Юрьевич | К.Э.Н.                 |         |      |

**Задание принял к исполнению студент:**

| Группа | ФИО                      | Подпись | Дата |
|--------|--------------------------|---------|------|
| 0Б51   | Очиров Евгений Эрдэмович |         |      |

## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

| Группа | ФИО                        |
|--------|----------------------------|
| 0Б51   | Очирову Евгению Эрдэмовичу |

| Школа               | ИЯТШ     | Отделение школы (НОЦ)     | Экспериментальной Физики |
|---------------------|----------|---------------------------|--------------------------|
| Уровень образования | Бакалавр | Направление/специальность | 03.03.02 Физика          |

Тема ВКР:

| Миграция дефектов в многослойной структуре Zr-Nb при ионной имплантации   |   |
|---|---|
| Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:   |   |
| 1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения  | В работе моделировалось явление миграции точечных дефектов в многослойной структуре Zr-Nb при ионной имплантации. Моделирование проводилось на ПЭВМ. Многослойный материал Zr-Nb актуален в среде ядерной энергетики, так как данный материал обладает самовосстанавливающимися способностями. Данный эффект обусловлен аннигиляцией дефектов на границе раздела двух фаз Zr-Nb. Моделирование позволяет наблюдать на уровне атомного масштаба данное явление и более детально его изучить. |
| Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:  |   |
| <b>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>– специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;</li> <li>– организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.</li> </ul> | Документы по воздействию ПЭВМ:<br>-Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 1.04.2019).<br>-СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений;<br>-СН2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки;<br>- СНИП 23-05-95"Естественное и искусственное освещение;<br>-СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03. Гигиенические требования к                            |

|  |   |
|--|---|
|  | <p>естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий;</p> <p>-СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий.</p>   |
| <p><b>2. Производственная безопасность:</b></p> <p>2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов</p> <p>2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия</p> | <p>Анализ выявленных вредных и опасных факторов:</p> <p>-Приводятся данные по эффективным и допустимым значениям микроклимата и звукового давления, электромагнитных полей и средства защиты, а также освещенность;</p> <p>Обоснование мероприятий по снижению воздействия:</p> <p>-Представлен план эвакуации из лаборатории;</p> <p>-Проведение допустимых для безопасности человека значения напряжения, тока; меры защиты от поражения электрическим током.</p> |
| <b>3. Экологическая безопасность:</b>  | <p>– Приведение меры охраны окружающей среды от отходов бумаги</p>  |
| <b>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</b>   | <p>– Приведение возможных чрезвычайных ситуаций (сильные морозы, диверсия);</p> <p>– Разработка меры по предупреждению чрезвычайных ситуаций;</p> <p>– Разработка действий в результате возникшей чрезвычайной ситуации и меры по ликвидации ее последствий.</p>  |

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

| Должность                      | ФИО                           | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|--------------------------------|-------------------------------|------------------------|---------|------|
| Старший преподаватель ООД ШБИП | Скачкова Лариса Александровна |                        |         |      |

Задание принял к исполнению студент:

| Группа | ФИО                      | Подпись | Дата |
|--------|--------------------------|---------|------|
| ОБ51   | Очиров Евгений Эрдемович |         |      |



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
 федеральное государственное автономное  
 образовательное учреждение высшего образования  
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Уровень образования бакалавриат

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Экспериментальной физики

Период выполнения

Форма представления работы:

Бакалаврская работа

(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

### КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН выполнения выпускной квалификационной работы

|  |  |
|--|--|
| Срок сдачи студентом выполненной работы: |  |
|--|--|

| Дата контроля | Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)  | Максимальный балл раздела (модуля) |
|---------------|--|------------------------------------|
| 01.03.2018    | Аналитический обзор литературы   | 15                                 |
| 01.09.2018    | Объект и методы исследования   | 15                                 |
| 30.12.2018    | Моделирование миграции точечных дефектов к границе раздела двух фаз в многослойной структуре Zr-Nb при ионной имплантации; | 20                                 |
| 30.04.2019    | Анализ результатов   | 15                                 |
| 25.05.2019    | Социальная ответственность   | 15                                 |
| 25.05.2019    | Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение  | 15                                 |
| 25.05.2019    | Заключение   | 5                                  |

Составил преподаватель:

| Должность                      | ФИО                            | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|--------------------------------|--------------------------------|------------------------|---------|------|
| Старший преподаватель ОЭФ ИЯШТ | Чистякова Надежда Владимировна | к.ф-м.н                |         |      |

**СОГЛАСОВАНО:**

| Руководитель ООП               | ФИО                   | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|--------------------------------|-----------------------|------------------------|---------|------|
| Руководитель отделения ЭФ ИЯТШ | Лидер Андрей Маркович | д.т.н., доцент         |         |      |

## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 77 с., 18 рисунков, 12 таблиц, 34 литературных источника.

Ключевые слова: моделирование, многослойный материал Zr-Nb, метод молекулярной динамики, имплантация, интерфейс.

Объектом исследования является молекулярно-динамическая модель Zr-Nb. Данная модель имеет свойство самовосстанавливаться при радиационных повреждениях, что делает его объектом внимания для исследования данного явления на атомном уровне. Существуют утверждения, что большинство радиационных дефектов мигрируют к границе раздела фаз, где они аннигилируются.

Цель работы – моделирование миграции точечных дефектов на границе раздела двух фаз в многослойной структуре Zr-Nb при ионной имплантации.

В процессе исследования проводилось моделирование структуры Zr-Nb и процесса ионной имплантации. Визуально показана миграция и аннигиляция точечных дефектов на интерфейсе.

В ходе проделанной работы образец наноразмерного многослойного металлического Zr/Nb покрытия был подвергнут облучению протонами. Приведена зависимость изменения числа междоузлий и изменения температуры от времени релаксации. В результате имплантации протонов низких энергий ( $\sim$  кэВ) в кристалле Zr-Nb образуются каскады смещений, что при их распространении увеличивает число вакансий вблизи интерфейса Zr-Nb. Междоузельные атомы и вакансии, образованные в результате каскадов смещений из-за механических напряжений в кристалле Zr-Nb мигрируют к границе Zr-Nb, а затем аннигилируют. Уменьшение числа междоузельных атомов согласуется с экспериментальными данными по измерению проводимости имплантированных водородом образцов.

Основные конструктивные, технологические характеристики: размер образца составляет 10:10:30 А.

Результаты моделирования могут быть полезны для исследователей, изучающие область «интеллектуальных» материалов, которые способны самовосстанавливаться, а также в области материаловедения, ядерной энергетики.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

|  |    |
|--|----|
| Введение .....   | 14 |
| Глава 1. Образования и миграция точечных дефектов, при различных внешних воздействиях, в многослойных структурах. .... | 16 |
| Глава 2. Методы исследования.....  | 30 |
| 2.1. Метод молекулярной динамики .....   | 30 |
| 2.2. Потенциалы взаимодействия .....   | 33 |
| 2.3. Программное обеспечение LAMMPS .....  | 36 |
| Глава 3. Экспериментальная часть.....  | 38 |
| 3.1. Генерация модели кристалла Zr-Nb .....  | 38 |
| 3.2. Результаты расчетов имплантации протонами в кристалл Zr-Nb .....  | 39 |
| 3.3. Расчет каскадов смещений.....   | 41 |
| Глава 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и<br>ресурсосбережение.....                                       | 42 |
| 4.1. Составление перечня работ .....   | 42 |
| 4.1.1. Продолжительность этапов работ .....  | 44 |
| 4.2. Расчет сметы затрат на выполнение проекта .....   | 49 |
| 4.2.1. Расчет заработной платы .....   | 49 |
| 4.2.2. Расчет затрат на социальный налог .....   | 50 |
| 4.2.3. Расчет затрат на электроэнергию .....   | 50 |
| 4.3. Расчет амортизационных расходов .....   | 52 |
| 4.3.1. Расчет прочих расходов .....  | 53 |
| 4.3.2. Расчет общей себестоимости разработки .....   | 53 |
| 4.3.3. Расчет прибыли .....  | 54 |
| 4.3.4. Расчет НДС .....  | 55 |
| 4.3.5. Цена разработки НИР.....  | 55 |
| 4.4. Оценка экономической эффективности проекта .....  | 55 |
| Глава 5. Социальная ответственность.....   | 56 |
| 5.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности .....   | 57 |
| 5.1.1. Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя)<br>правовые нормы трудового законодательства. ....     | 57 |
| 5.2. Производственная безопасность. ....   | 58 |
| 5.3. Анализ вредных факторов производственной среды .....  | 59 |

|   |    |
|---|----|
| 5.3.1. Микроклимат .....                                  | 59 |
| 5.3.2. Производственный шум .....                         | 60 |
| 5.3.3. Электромагнитные поля .....                        | 62 |
| 5.3.4. Освещенность .....                                 | 63 |
| 5.4. Анализ опасных факторов производственной среды ..... | 65 |
| 5.4.1. Электробезопасность .....                          | 65 |
| 5.5. Охрана окружающей среды .....                        | 67 |
| 5.6. Безопасность в чрезвычайных ситуациях .....          | 67 |
| 5.6.1. Факторы пожарной и взрывной природы .....          | 68 |
| Вывод .....   | 70 |
| Заключение .....  | 71 |
| Список литературы .....                                   | 72 |

## Введение

Разработка ядерных материалов, способных выдержать экстремальные повреждения, является важной задачей для будущих ядерных реакторов. Во время работы создаются радиационные дефекты [1] (например, пары Френкеля), которые могут образовывать промежуточные кластеры, тетраэдры дефектов упаковки, пустоты и т.д. [2,3]. В конечном итоге это может привести к набуханию, затвердеванию, аморфизации и охрупчиванию, которые являются основными причинами разрушения материала [4]. Чтобы предотвратить или, по крайней мере, свести к минимуму эти вредные воздействия на структурные компоненты, предлагается использовать материалы, содержащие интерфейсы или границы раздела зерен, поскольку внутри атомов металла, примесные атомы мигрируют в основном именно туда, если только они не оказались в ловушке внутри вакансии [11]. Точно так же точечные дефекты могут мигрировать к этим границам, которые могут действовать как сток для радиационных точечных дефектов [12]. В последнее время было получено несколько вариантов нанокристаллических материалов (например, Cu-Nb[12], Cu-Fe[14], Mg-Nb[16]) которые имеют лучшую радиационную стойкость по сравнению с их поликристаллическими аналогами. Эти экспериментальные результаты согласуются с предположением, что интерфейсы и границы зерен поглощают дефекты, но как дефекты взаимодействуют с ними в атомном масштабе, далеко не понятны. В частности, температуры в некоторых экспериментах по облучению настолько низки, что вакансии неподвижны, но их аннигиляция все еще как-то усиливается [7]. Поэтому, чтобы иметь возможность разрабатывать такие материалы, сначала необходимо понять, на уровне атомного масштаба, механизм, который обеспечивает устойчивость интерфейса и всей системы при радиационном повреждении.

Из всех выше представленных многослойных материалов, особое внимание привлекла система Zr-Nb, имеющая интерфейс ГЦК-ОЦК. Такая система может сохранять высокую твердость даже при 400 С [8] и

демонстрирует замечательную стойкость к  $\gamma$  облучению [15] и тяжелых Si [31]. Кроме того, оба Zr и Nb имеют высокую теплопроводность. Все эти свойства системы Zr-Nb по сравнению с другими, упомянутые выше, делают этот материал объектом для внимания с радиационно-стойкими, самовосстанавливающимися свойствами [10,13].

Целью данной работы является моделирование миграции точечных на границе раздела фаз в многослойном металлическом материале Zr-Nb при ионной имплантации.

Для реализации данной цели были поставлены следующие задачи:

1. Конструирование слоистой структуры Zr-Nb в программе Lammps
2. Моделирование процесса ионной имплантации в слоистую структуру
3. Определение типа и числа дефектов, образованных в процессе ионной имплантации
4. Анализ эволюции дефектной структуры в процессе отжига

## Глава 1. Образования и миграция точечных дефектов, при различных внешних воздействиях, в многослойных структурах.

Нанокристаллическим материалам уделяется большое внимание в связи с их потенциалом улучшения функциональности, и они являются эффективными материалами, выдерживающие воздействие в экстремальных условиях, где ожидается, что интерфейсы будут способствовать радиационной стойкости. Однако точная роль интерфейсов в изменении поведения дефектов неясна. Для наблюдения и анализа точечных дефектов в работе [10] авторы исследовали механизмы взаимодействия дефектов с зернами в меди от пикосекундных до микросекундных временных масштабов. При облучении междоузлия мигрирует в границу зерна, которая затем действует как источник, испуская междоузлия для уничтожения вакансий в объеме.

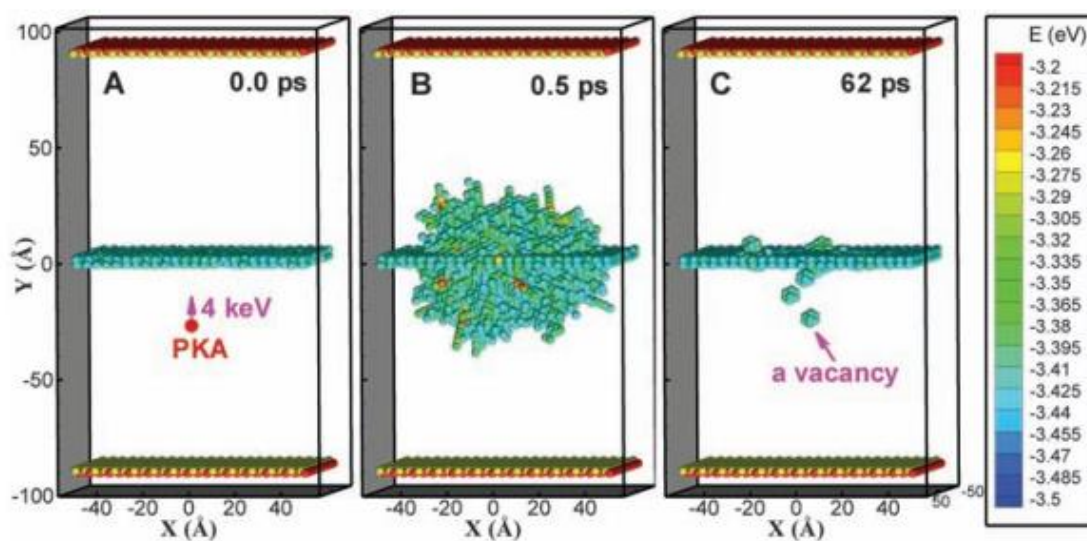


Рисунок 1 - Моделирование радиационно-индуцированных точечных дефектов (атом внедрения и вакансий) в объемной области при внедрении междоузлия PKA [10].

На рисунке 1 показан каскад столкновений при 300 K, атомы окрашены в соответствии с их потенциальной энергией, те атомы, которые имеют энергию  $< 3,43$  эВ считаются не дефектными и не показаны. В первоначальном этапе (на



рисунке 1А), атом внедрения с энергией 4 кэВ инициируется с 25 Å ниже границ зерен с определенной скоростью, направленной перпендикулярно к границе зерна. После 0,5 пс (рисунки 1В), каскад достигает своего максимального размера, а после 62 пс (рисунки 1С), каскад остывает, некоторые вакансии остаются ниже и выше границы зерна. Наибольшая концентрация дефектов создается вблизи центра каскада, после его остывания, количество дефектов в объеме уменьшается больше всего, так как центр перекрывается с границами зерен.

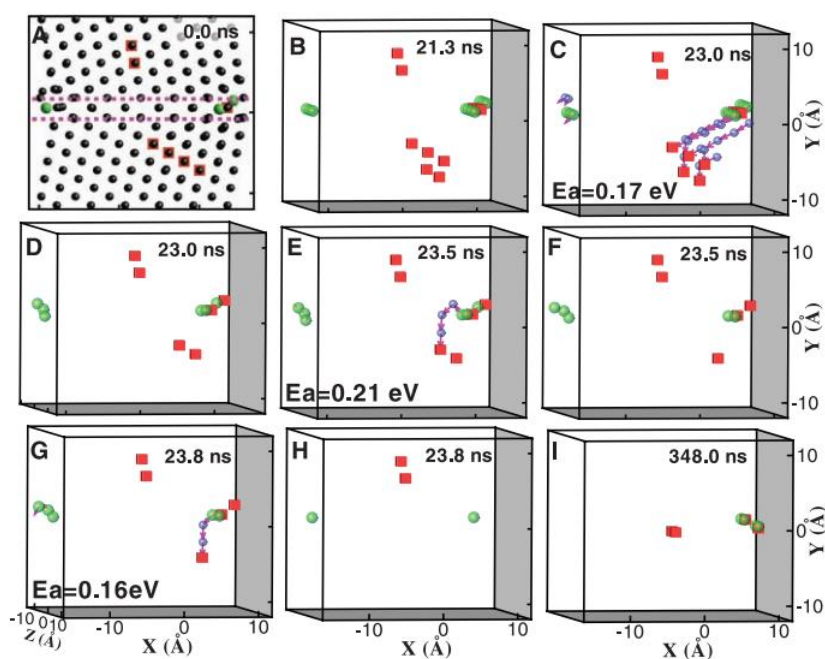


Рисунок 2 - Аннигиляция радиационно-индуцированных точечных дефектов в границе раздела. Зеленые атомы – междоузлия, красные кубики – вакансии, синие сферы, атомы, которые перемещаются более чем на 1 Å во время события [10].

На рисунке 2 представлена атомная структура, представляющая собой структуру повреждения после внедрения атома в 2,5 кэВ. В первоначальной поврежденной структуре есть пять вакансий внизу и две вакансии выше границы зерна, с семью междоузлиями, поглощенными зерном, которые образуют единый кластер. Первоначально пять вакансий ниже зерна перестраиваются (энергия активации 0,16-0,49), также образуя кластер (рис.

2B). При нескольких наносекундах (рисунок 2, C и D) событие приводит к аннигиляции трех вакансий, уменьшая энергию системы. На рисунке 2C атомы, смещенные более чем на  $1,0 \text{ \AA}$ , показаны в виде синих сфер. В данном случае, граница зерна действует как источник, испускающий атомы внедрения через процесс замены, то есть атомы внедрения выталкиваются из зерна в вакансии. В этом механизме вакансии не перемещаются. Однако, когда вакансии присутствуют в соседнем объеме, межузельное излучение может происходить с гораздо меньшими энергетическими барьерами (рисунок 3C). После того, как три вакансии были уничтожены, на каждой стороне границы зерна осталось по две вакансии (рисунок. 2D). Две вакансии внизу также аннигилируют посредством процессов межбарьерной эмиссии (рисунок 2, E - H), после чего в объеме остаются еще две вакансии и два атома внедрения (рисунок 2H). Эти вакансии образуют кластер и диффундируют к границе зерна через обычное «скачкообразное изменение» (рисунок 2I) с энергиями активации в диапазоне от 0,23 до 0,39 эВ. После чего система почти полностью самовосстанавливается (рисунок 2I). Такой механизм рекомбинации имеет гораздо более низкий энергетический барьер, чем обычная диффузия вакансий, и эффективен для уничтожения неподвижных вакансий в соседнем объеме, что приводит к самовосстановлению.

Также говоря о самовосстановлении, но уже в другой среде, в работе [11] проводилось моделирование непосредственно уже со слоистым материалом Zr-Nb, исследователи привели расчеты для механических свойств многослойной системы 6Zr-6Nb с наличием и отсутствием дефектов и поведением He в межфазной границе. Авторы утверждают, что слоистые структуры, по меньшей мере, столь же прочны, как объемный, но в многослойной структуре существует слабая связь на границе раздела, что делает эти слоистые системы более хрупкими к изгибу, так как модули Юнга и сдвига немного ниже.

Основная причина, почему происходит миграция дефектов и примесей в слоистом материале, объясняется тем, что, когда две поверхности вступают в

контакт для создания интерфейса, происходит перенос заряда со стороны Zr на сторону Nb, так что 1-й слой Zr заряжается положительно, а 1-й слой Nb заряжается отрицательно. Интерфейс действует как приемник для вакансий и междоузлий, а также для того, чтобы атом He мигрировал на границу раздела фаз, где собственно происходит аннигиляция точечных дефектов. В случае, когда в системе присутствуют как атом He, так и вакансия, атом He будет перемещаться внутри вакансии, чтобы заполнить пустое пространство, как если бы это был атом замещения, не образуя никаких связей. Так как он притягивается туда из-за низкой электронной плотности внутри вакансии. В отсутствие вакансий атомы He будут занимать позиции в 1-м слое Zr (рисунок 3).

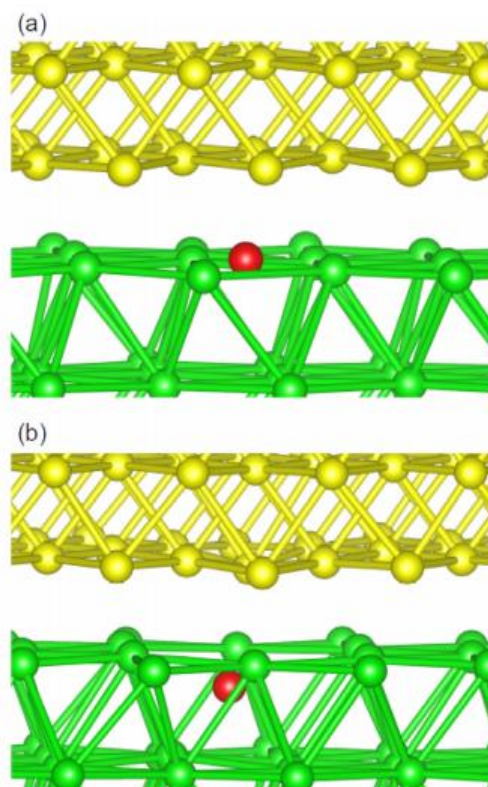


Рисунок 3 - Моделирование границентрированного случая с одним He на 1-м слое Zr (a) и (b)случай с одной вакансией и с одним атомом He, когда он находится внутри вакансии на 1-м слое Zr. Желтые, зеленые и красные сферы представляют атомы Nb, Zr и He соответственно [11].

Если в системе более одного атома гелия, то все они будут втянуты в интерфейс. Однако маловероятно, что они займут одни и те же или соседние промежуточные участки, поскольку даже один атом Не несколько искажает расположение соседних атомов решетки. Атомы Не будут накапливаться в основном на стороне Zr границы раздела из-за более низкой электронной плотности.

Еще одна работа [12], в которой выясняют роль границ раздела в уменьшении радиационных повреждений в многослойных композитах Cu-Nb. Исследователи провели моделирования атомного масштаба с использованием потенциалов встроенного атома (EAM) 7. Моделирование каскада проводилось при кристаллической гранецентрированной кубической решетки (ГЦК) меди и объемно-центрированной кубической решетки (ОЦК) ниобии. Толщина слоев в этих конфигурациях составляла  $\sim 4$  нм. Используемые в этих моделях первичные энергии атомов при ударе колебались от 0,5 кэВ до 2,5 кэВ (рисунок 4).

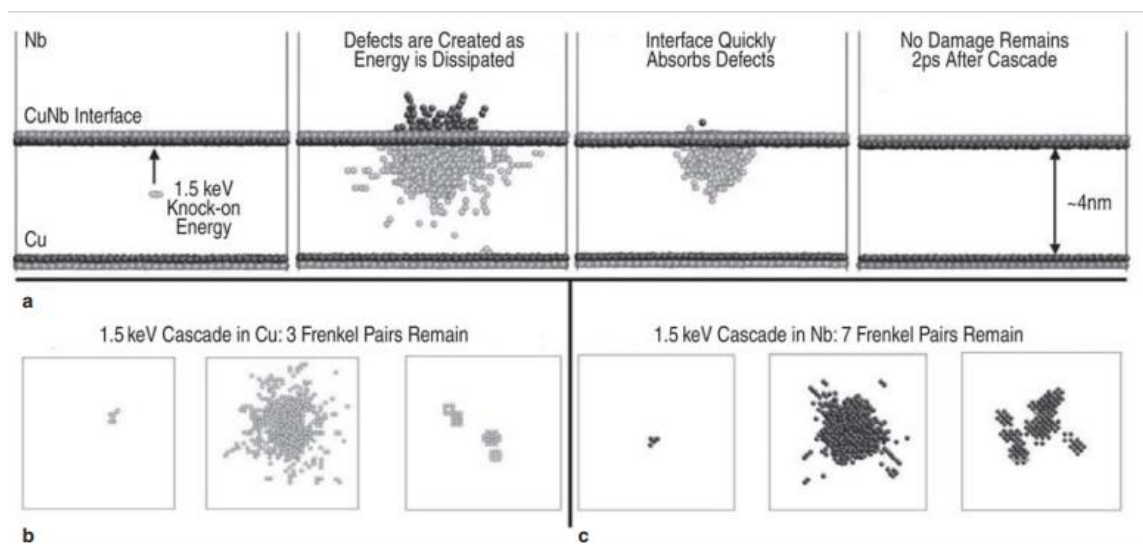


Рисунок 4 - Моделирование каскада столкновение и аннигиляции дефектов в а) многослойной структуре Cu-Nb, б) структуре Cu с) структуре Nb[12].

Каскадное моделирование выявило четкую разницу между величинами радиационного повреждения - в виде пар вакансий - внедрения (Френкеля),

поддерживаемых идеальной кристаллической решеткой меди или ниобия, по сравнению с многослойным композитом Cu-Nb. В то время как все каскады столкновений, возникающие в кристаллах, приводили к радиационному повреждению (например, рисунок 4б и 4в), число точечных дефектов, оставшихся после столкновений в окрестности границ раздела Cu-Nb, всегда было заметно меньше. На рис. 3а, не осталось точечных дефектов, поскольку все вакансии и внедрения, созданные в каскадном ядре, были быстро поглощены на границе раздела Cu-Nb, где они рекомбинировали.

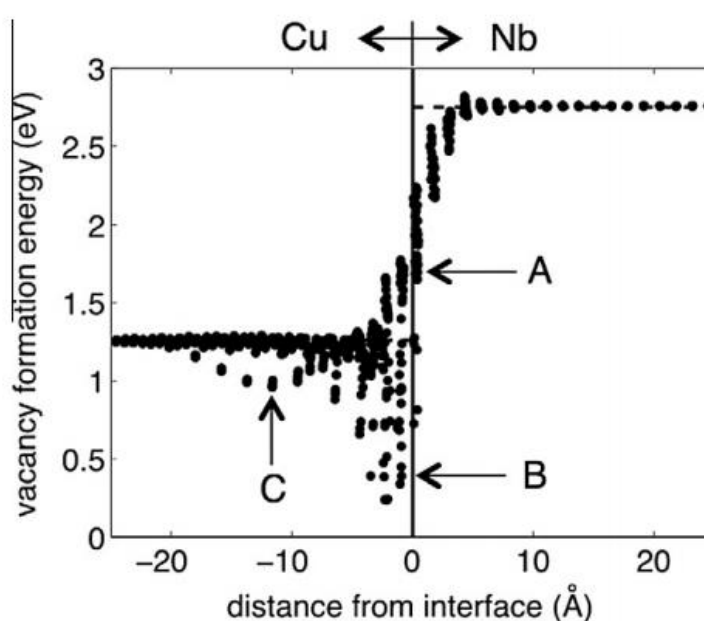


Рисунок 5 - Энергия образования точечных дефектов [12,13].

На рисунке 5 показана зависимость энергии образования вакансий от расстояния от первоначально точечной бездефектной границы раздела Cu – Nb. При достаточно большом расстоянии от границы раздела, вакансии имеют те же энергии образования, что и в совершенных кристаллических ГЦК Cu и ОЦК Nb. Однако вблизи границы раздела энергия энергий сильно варьируется и зависит от расположения вакансий на границе раздела. Также на рисунке 5 выделены три направления энергии образования вакансий. В некоторых местах, помеченных буквой «А» (рисунок 5), энергии образования вакансий являются промежуточными между энергиями ГЦК-Cu и ОЦК-Nb и постепенно изменяются на пяти атомных слоях в зависимости от положения к границе

раздела. В этих местах вакансии Nb могут попасть в ловушку, но вакансии Cu будут от них отталкиваться. В других местах, обозначенных «В» (рисунок 5), энергии образования вакансий ниже, чем в ГЦК-Cu или ОЦК-Nb. Такие области находятся преимущественно на стороне Cu интерфейса и являются ловушками для вакансий как Cu, так и Nb. Наконец, участки, помеченные буквой «С», представляют собой мелкие ловушки вакансий и связанные с ними дефекты упаковки, создаваемые в Cu дислокациями.

В выше приведенных исследованиях утверждается, что несмешивающиеся металлические многослойные материалы с некогерентными интерфейсами могут эффективно снижать радиационно-индуцированные дефекты. Но есть суждение что, плотность дефектов в слоях должна изменяться в зависимости от расстояния до границы слоя. В доказательство всего этого, в исследовании [14] объемный слой Cu и многослойные Cu / Fe с толщиной слоя  $h$ , 5 нм и 100 нм подвергались облучению ионами меди до 1 dpa при комнатной температуре. Быстрое образование и распространение кластеров дефектов наблюдалось в объемном слое Cu, в то время как меньшее количество дефектов создавалось в мультислоях Cu / Fe с меньшим  $h$ . Это также объясняется тем, что на границе раздела слоев Cu / Fe совокупная плотность дефектов уменьшается.

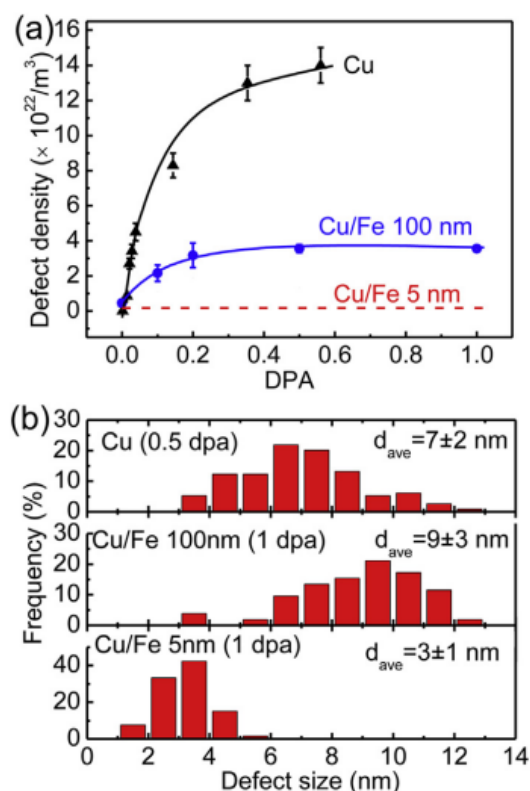


Рисунок 6 - Графики плотности и размера идентифицируемых дефектных кластеров в облученном ионами меди, монокристаллическом Cu толщиной 100 нм и многослойных Cu / Fe 100 нм и Cu / Fe 5 нм [14]

На рисунке 6а видно, что быстрое образование и распространение дефектов наблюдалось в монокристаллическом Cu, в то время как меньшее количество дефектов с меньшими размерами создавалось в многослойных Cu / Fe с меньшим  $h$ . А на рис.6б показано, что средний размер обнаруживаемого дефекта в облученном монокристаллическом Cu составляет  $7 \pm 2$  нм, по сравнению с  $9 \pm 3$  нм для Cu / Fe 100 нм и  $3 \pm 1$  нм для облученных Cu / Fe 5 нм. Также авторы утверждают, что в течение всего радиационного эксперимента в слоях Fe наблюдалось мало различных дефектных скоплений. Интерфейсы слоя остались практически неизменными после облучения.

А, например, в статьях [15,16], авторы исследовали влияние радиационного повреждения на структурные и механические свойства многослойного материала Zr-Nb с различной периодичностью. Авторы объясняют, что для многослойного материала с периодичностью 6 нм



облучение ионами Si привело к высокому уровню беспорядка, что привело к значительному радиационному упрочнению (рисунок 7).

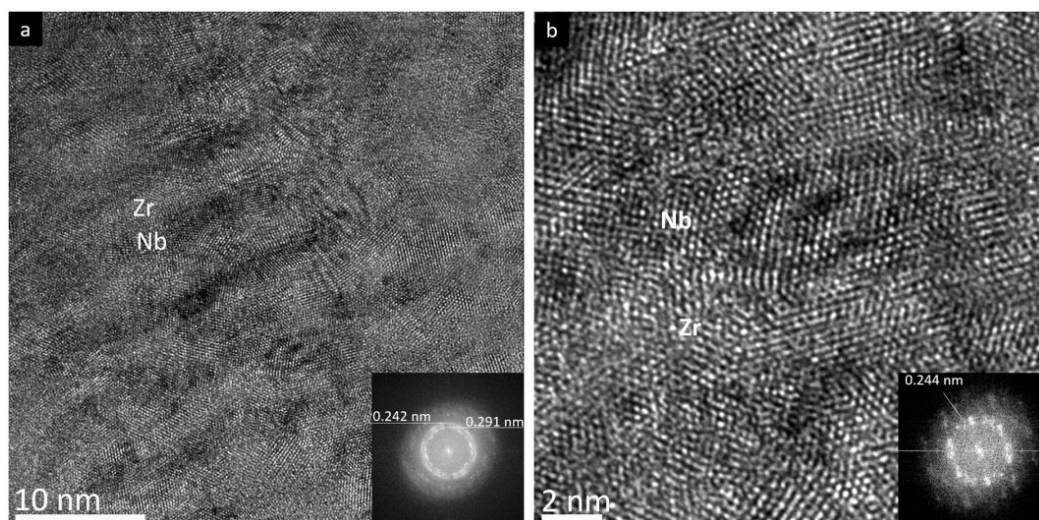


Рисунок 7 - Изображение Zr-Nb с периодичностью бнм после облучения, (а) слоистая структура, (б) увеличенная область, показывающая аморфную структуру [15].

А для многослойного материала с периодичностью 27 нм радиационное повреждение имело форму неупорядоченных доменов, а иногда нано пустот. Кроме того, авторы наблюдали увеличение степени межфазной когерентности между слоями в зависимости от дозы облучения (рисунок. 8).

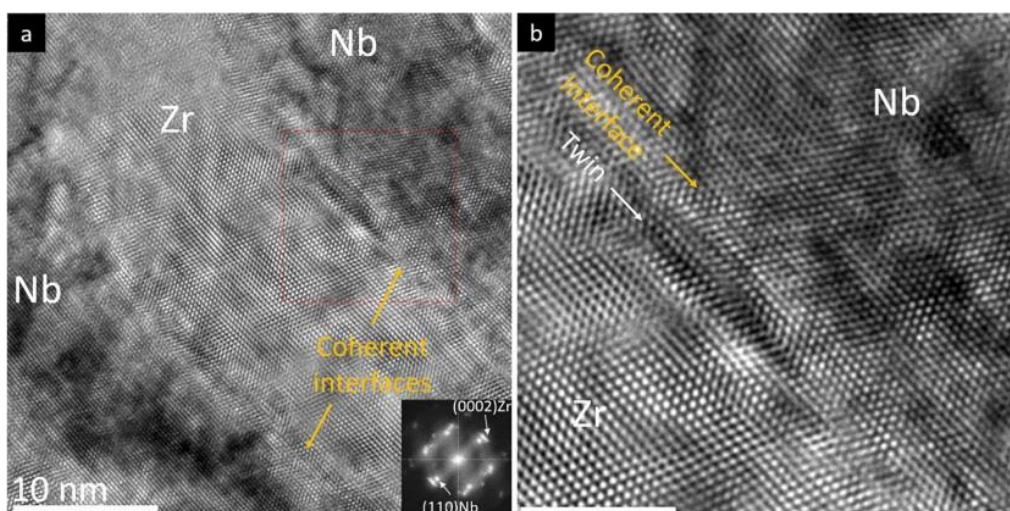


Рисунок 8 - Изображение Zr-Nb с периодичностью 27 нм после облучения, (а) слоистая структура, (б) когерентная структура [15]



В случае материала, с периодичностью 27 нм, не было обнаружено заметных упрочняющих эффектов, но устойчивость к радиационному повреждению была высокая из-за баланса между двумя конкурирующими механизмами деформации, главным образом, передачей дислокаций через индуцированные излучением когерентные границы раздела и взаимодействием дислокаций с радиационными дефектами. Подобное исследование было проведено в статье [17] только уже с многослойным материалом Mg-Nb. Авторы также утверждают, что при уменьшении толщины слоев с 200 нм до 25 нм возникает увеличение твердости и достигает максимального значения при толщине слоев 30-40 нм. Также в статье говорится, что при уменьшении слоя Mg, он становится метастабильным с образованием ОЦК решетки, подобное свойство характерно и для Zr.

Прочность многослойных металлических слоев увеличивается с уменьшением толщины слоя и достигает максимума при толщине слоя в несколько нанометров. Единичные процессы проскальзывания через межфазную границу, без механического преимущества накопления дислокаций, имеют решающее значение при определении максимальной силы потока в многослойных материалах. В работе [18] изучалась атомная структура интерфейса и взаимодействие одной дислокации с ней, чтобы выяснить роль атомной структуры и свойств интерфейса в механизме переноса скольжения через нее. Также обсуждается роль атомной структуры интерфейса в хранении и восстановлении дислокаций на интерфейсах. В эксперименте применялась некогерентная структура ОЦК-ГЦК материала Cu-Nb. Авторы утверждают, что поле напряжений скользящей дислокации, приближающейся к интерфейсу, локально сдвигает интерфейс, что приводит к растягиванию и захвату ядра дислокации в плоскости интерфейса. Таким образом, захват скользящих дислокаций на интерфейсе при расширении ядра является ключевым процессом, который определяет барьер интерфейса для передачи скольжения.

Максимальная прочность, достигаемая в некогерентном многослойном слое, может зависеть от прочности на сдвиг интерфейса (рисунок 9).

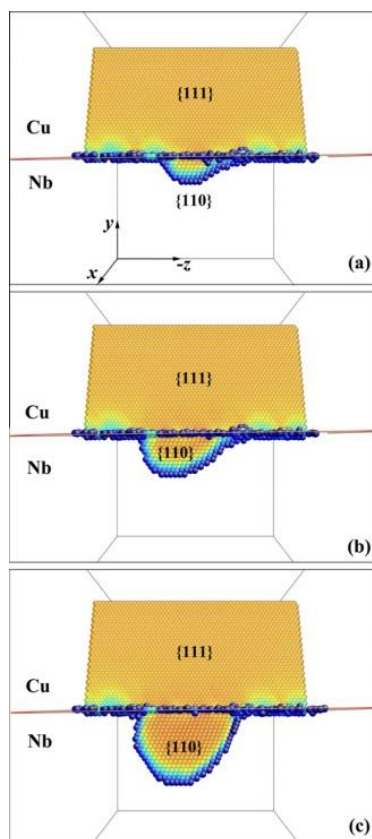


Рисунок 9 - Атомистическое моделирование передачи скольжения через границу Cu / Nb[18].

Полная дислокация с вектором Бюргерса  $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle$  на плоскости  $\{111\}$  первоначально приближается к границе раздела Cu / Nb, что приводит к зарождению дислокационной петли в Nb (рисунок 9). Атомистическое моделирование показало, что низкое сопротивление сдвигу границы раздела Cu – Nb позволяет дислокаций скользить с высокой подвижностью. Наконец, дислокация выступает в качестве идеального источника для вакансий, а интерфейс действует как сток для вакансий.

В данном исследовании мы использовали потенциал Zr-Nb.adp.alloy, разработанный авторами в статье [19]. В работе потенциальные функции были адаптированы к данным abinitio, рассчитанным для большого набора эталонных структур. Авторы показывают, что структура и свойства всех фаз Nb и Zr,

существующих в бинарной системе Zr-Nb, воспроизводятся с хорошей точностью. Первоначально структура данного сплава Zr-Nb определяется его технологическим процессом, который включает термическую обработку наряду с различными типами деформации, обеспечивающими желаемые свойства. В данной работе авторы рассмотрели твердые растворы Zr-Nb на основе ОЦК и ГПУ аллотропных модификаций Zr. Для моделирования применялся потенциал ADP (вычисляет парные взаимодействия для металлов и металлических сплавов) для исследования ГПУ-сплавов, содержащих до 7 Nb ат.%. Структура таких сплавов определялась двумя параметрами решетки ( $a_{\text{hcp}}$  и  $c_{\text{hcp}}$ ), которые проявляют тенденцию к уменьшению при добавлении ниобия.

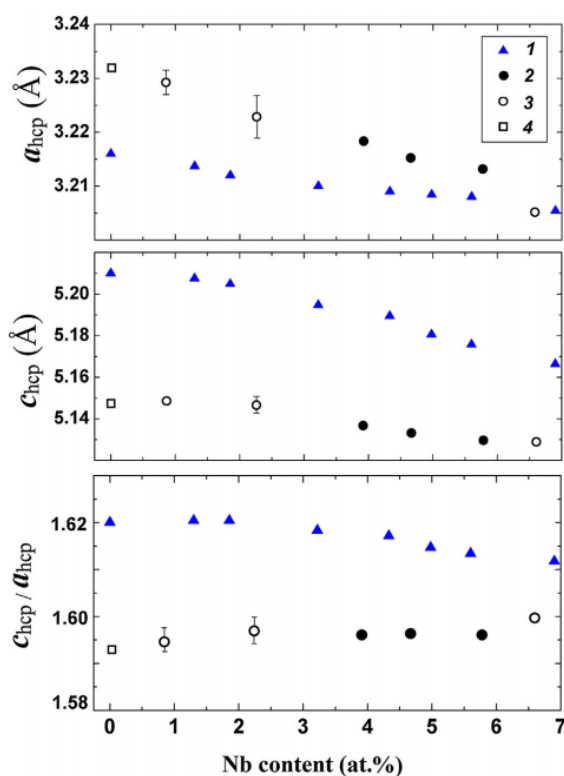


Рисунок 10 - Параметры решетки ГПУ-сплавов Zr-Nb, содержащих различное количество ниобия (при 300 К) [19]. 1 - результаты моделирования с ADP; 2 - экспериментальные данные из [54], 3 - эксперименты, представленные из [55], 4 - экспериментальные точки из [56].

Согласно экспериментам, проведенным различными исследовательскими группами, соотношение между этими значениями поддерживается постоянным. На рисунок 9 показан первый проверочный тест на правильность работы потенциала. Создается несколько моделей случайных твердых растворов, содержащих различное количество ниобия. Каждая модель имеет ГПУ-структуру с единичными параметрами решетки, которые обеспечивают нулевое давление. Параметры решетки моделируемых сплавов уменьшаются с добавлением ниобия. Расчетные значения  $a_{\text{ср}}$  в целом согласуются с экспериментальными данными, тогда как  $c_{\text{ср}}$  завышен. Тем не менее, в случае  $c_{\text{ср}}$  изменения параметра в исследуемом интервале концентраций весьма схож с оцененным из экспериментов. Самая нижняя панель на рисунок 10 показывает, что отношение  $c_{\text{ср}} = a_{\text{ср}}$ , полученное из моделирования МД, сохраняет свое постоянное значение с ростом содержания ниобия. Этот факт также подтверждает, что созданная ADP обеспечивает правильное описание параметров решетки различных ГПУ-сплавов Zr-Nb при комнатной температуре.

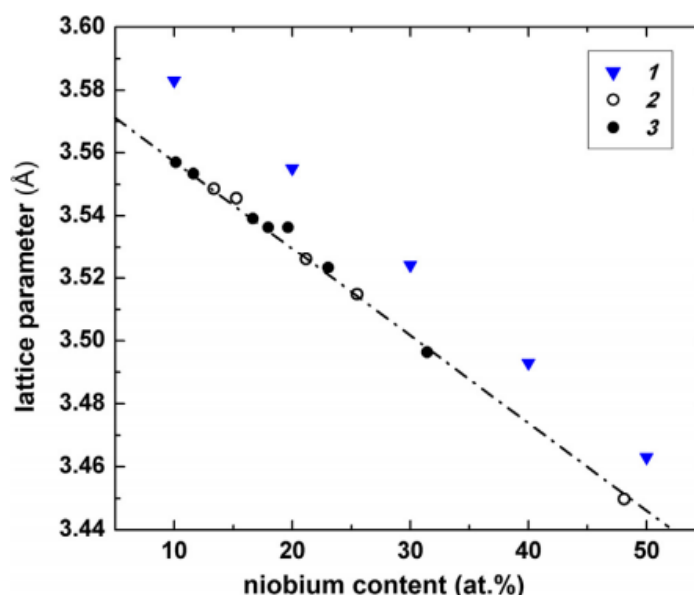


Рисунок 11 - Параметры решетки ОЦК-сплавов Zr-Nb [19]. 1 - результаты моделирования с ADP ( $T = 600$  K); 2 и 3 - экспериментальные данные из [54] соответственно ( $T = 300$  K).

Другой проверочный тест, проведенный в этой работе, касается моделирования ОЦК-сплавов Zr-Nb. Для этого авторы построили серию моделей, соответствующих случайным твердым растворам Nb в ОЦК Zr. В этих моделированиях структура сплавов наблюдалась в другом диапазоне концентраций - до 50% Nb. Температуру поддерживали равной 600 К, а давление устанавливали на 0 ГПа в каждой расчетной точке. Для проверки результатов расчета были взяты результаты экспериментальных данных. Сравнение экспериментальных и расчетных результатов проведено на рисунок 11. ADP четко обеспечивает линейное уменьшение параметра решетки  $a_{\text{bcc}}$  в ответ на увеличение содержания ниобия в сплаве. Этот факт хорошо согласуется с экспериментальными данными и согласуется с законом Вегарда. Более того, наклон этой рассчитанной линейной зависимости такой же, как и у экспериментальных точек (обозначены пунктирной линией, рисунок 11).

Также межатомный потенциал использовался для оценки энергий, связанных с образованием и миграцией точечных дефектов. Авторы вычисляют энергию идеальной (бездефектной) системы и сравнивают ее с энергией, связанной с системой, содержащей дефект. При моделировании диффузии, авторы наблюдали, что миграция точечных дефектов оказывается анизотропной.

## **Глава 2. Методы исследования**

### **2.1. Метод молекулярной динамики**

Методы компьютерного моделирования является оптимальным инструментом для решения проблемы многих тел в статистической физике, физической химии и биофизике [20]. Хотя теоретическая интерпретация сложных систем в области статистической физики хорошо разработана, а экспериментальные методы получения подробной микроскопической информации довольно сложны, зачастую конкретные аспекты этих систем можно детально изучить при помощи моделирования. С другой стороны, для моделирования требуются конкретные входные параметры, которые характеризуют данную систему и исходят либо из теоретических предположений, либо из экспериментальных данных. Охарактеризовав физическую систему с точки зрения параметров модели, моделирование часто используется как для решения теоретических моделей за пределами определенных приближений, так и для подсказки экспериментаторам для дальнейших исследований. В случае больших экспериментальных установок часто требуется подтвердить потенциальные результаты эксперимента при помощи компьютерного моделирования. Таким образом, говорят, что область компьютерного моделирования является очень важной отраслью науки, которая, с одной стороны, помогает теоретикам и экспериментаторам выходить за рамки своих присущих ограничений, а с другой стороны, является самостоятельной научной областью.

Общепринятые методы моделирования для систем множества тел можно разделить на два класса стохастического и детерминированного моделирования, которые в значительной степени охватываются методом Монте-Карло (MC) и методом молекулярной динамики (MD) соответственно [21]. Моделирование методом Монте-Карло исследует пространство

конфигурации пробными движениями частиц. В рамках так называемого алгоритма изменение энергии от шага  $n$  до  $n + 1$  используется в качестве триггера для принятия или отклонения новой конфигурации. Пути к более низкой энергии принимаются всегда, пути к более высокой энергии принимаются с вероятностью, определяемой статистикой Больцмана. Таким образом, свойства системы рассчитываются исходя из среднего значения по всем движениям Монте-Карло (где за каждое движение, степень свободы оценивается один раз) [22]. Однако, методы МД регулируются гамильтонианом системы, и, следовательно, уравнения движения Гамильтона интегрируются для перемещения частиц в новые положения и для получения новых скоростей в этих новых положениях [23,24]. Это является преимуществом моделирования МД по отношению к МК, поскольку исследуется не только пространство конфигурации, но и все фазовое пространство, которое дает дополнительную информацию о динамике системы. Оба метода являются взаимодополняющими по своей природе, но они приводят к одним и тем же средним статическим величинам, учитывая, что используется один и тот же статистический ансамбль.

Для моделирования частиц всегда требуется модель взаимодействия между составляющими системы. Эта модель должна быть проверена на основе экспериментальных результатов, то есть она должна воспроизводить или аппроксимировать экспериментальные результаты, такие как функции распределения или фазовые диаграммы, и теоретические ограничения, то есть она должна подчиняться определенным фундаментальным или ограничивающим законам, таким как сохранение энергии. Что касается моделирования МД, ингредиенты для программы в основном тройные. (1) Как уже упоминалось, необходима модель взаимодействия между составляющими системы (атомами, молекулами и т.д.). В большинстве случаев предполагается, что частицы взаимодействуют только попарно. Это предположение значительно уменьшает вычислительные усилия и работу по внедрению модели

в программу. (2) Необходим интегратор, который распространяет положения частиц и скорости от времени  $t$  до  $t + \delta t$ . Это конечно-разностная схема, которая перемещает траектории дискретно во времени. Шаг по времени  $\delta t$  должен быть правильно выбран, чтобы гарантировать стабильность интегратора, то есть не должно быть никакого отклонения в энергии системы. (3) Должен быть выбран статистический ансамбль, где контролируются термодинамические величины, такие как давление, температура или количество частиц. Естественным выбором ансамбля при моделировании МД является микроканонический ансамбль (NVE), поскольку гамильтониан системы без внешних потенциалов является сохраняющейся величиной. Тем не менее, существуют расширения гамильтониана, которые также позволяют моделировать различные статистические ансамбли [23].

Эти шаги по существу определяют моделирование МД. Имея этот инструмент под рукой, можно получить точные результаты в пределах числовой точности. Результаты верны только для модели, которая входит в симуляцию, и они должны быть проверены на соответствие теоретическим прогнозам и экспериментальным результатам [23,25]. Если результаты моделирования отличаются от свойств реальной системы или несовместимы с убедительными теоретическими проявлениями, модель должна быть уточнена. Эту процедуру можно понимать, как адаптивное уточнение, которое в итоге приводит к приближению модели реального мира хотя бы для определенных свойств. Сама модель может быть построена из правдоподобных соображений, где параметры выбираются из нейтронографических. Это также может быть результатом первичных исследований, таких как квантовые вычисления *abinitio* (приближение рассчитывается очень точно). Этот тип построения модели содержит также некоторые приближения, так как взаимодействия многих тел в основном игнорируются (это значительно увеличит пространство параметров в расчете модели). Тем не менее, это часто обеспечивает хорошую отправную точку для реалистичной модели.



Ясно, что производительность моделирования динамики частиц сильно зависит от компьютерной техники. Впервые моделирование с использованием метода МД были выполнены в 1957 г. Б. Дж. Олдером и Т. Э. Уэйнрайтом, которые моделировали фазовый переход системы твердых сфер [26]. В этом раннем моделировании, которое выполнялось на IBM-704, можно было моделировать до 500 частиц и рассчитать до 500 столкновений в час. Принимая во внимание 200000 столкновений для производственного цикла, эти моделирование продолжалось более двух недель. Распространение твердых сфер в моделировании определяется событиями столкновения между двумя частицами. Следовательно, распространение основано не на интегрировании уравнений движения, а на расчете времени следующего столкновения, что приводит к переменному временному шагу в расчетах.

## 2.2. Потенциалы взаимодействия

Часто точные знания о взаимодействии между атомами, молекулами или поверхностями не известны, и модель строится для того, чтобы описать основные особенности некоторых наблюдаемых. Помимо налагаемых граничных условий, это модель, которая полностью определяет систему с физической точки зрения. В классическом моделировании объекты чаще всего описываются точечными центрами, которые взаимодействуют через потенциалы тел.

Простейшими видами потенциалов взаимодействия, используемые в молекулярной динамике, являются парные потенциалы. При аппроксимации парных потенциалов энергия системы частиц представляется в виде суммы потенциальных энергий взаимодействия всех пар атомов:

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, (i \neq j)}^N \varphi(r_{ij}) \quad (1)$$

где  $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$  - расстояние между атомами пары  $i$ - $j$ .

Таким образом, очень сложное описание динамики электронов отбрасывается и создается картина, в которой основные характеристики, такие как ядро частицы или внутренние степени свободы молекулы, моделируются набором параметров и аналитическими функциями, которые зависят от взаимного положения частиц в конфигурации.

Все парные потенциалы - это эмпирические потенциалы, основанные на формулах, где параметры подбираются так, чтобы потенциал правильно описывал свойства вещества. Наиболее часто использующимися парными потенциалами являются потенциалы Леннарда-Джонса и Морзе.

Потенциал Леннарда-Джонса имеет вид

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (2)$$

где  $\sigma$  и  $\varepsilon$  - постоянные коэффициенты, имеющие размерности длины и энергии. Выражение  $\left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12}$  описывает процесс отталкивания атомов расплывших на близких расстояниях. Отталкивание происходит вследствие перекрывания электронных оболочек атомов, вызывая резкое увеличение энергии системы (принцип Паули). А выражение  $\left( \frac{\sigma}{r} \right)^6$  моделирует притяжение на больших расстояниях, связанное с диполь-дипольным взаимодействием. Константы  $\varepsilon$  и  $\sigma$  определяются путем подгонки глубины минимума потенциала к энергии связи металла  $\varepsilon_0$  и положения минимума к равновесному расстоянию между атомами. Часто потенциал Леннарда-Джонса дает разумное приближение к истинному потенциалу. Однако из точных квантовых вычислений *abinitio* потенциал отталкивания экспоненциального типа часто более уместен. Особенно для плотных систем слишком сильная отталкивающая часть часто приводит к переоценке давления в системе. Поскольку в вычислительном отношении взаимодействие Леннарда-Джонса весьма привлекательно, отталкивающая часть иногда заменяется более слабым отталкивающим слагаемым, например,  $r^{-9}$ .

Потенциал Морзе имеет вид

$$U(r_{ij}) = \varepsilon [e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)}], \quad (3)$$

Присутствие трех параметров  $\varepsilon$ ,  $\alpha$  и  $r_0$  позволяет подгонять потенциал, вдобавок к энергии связи и параметру решетки, к модулю всестороннего сжатия кристалла, что делает его приближения более точным к истинному. С другой стороны, такое выражение с каждым добавленным параметром, становится большим и трудно решаемым. Такие выражения уже решают при помощи «сшивки» нескольких полиномиальных функций (сплайн-потенциалы).

Поскольку параметры и функции дают полную информацию об энергии системы, а также о силе, действующей на каждую частицу через  $F = -\nabla U$ , комбинация параметров и функций также называется силовым полем [28].

Для случая парных потенциалов силы рассчитываются следующим образом:

$$\begin{aligned} \vec{F}_i &= -\nabla_i U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = -\frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, (i \neq j)}^N \varphi(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \right\} = -\sum_{i \neq j} \nabla_i \varphi(\vec{r}_i - \\ &\vec{r}_j) - \sum_{(i \neq j)} \left( \vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x_i} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y_i} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z_i} \right) \varphi(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = -\sum_{(i \neq j)} \left( \vec{e}_x \frac{\partial r_{ij}}{\partial x_i} + \vec{e}_y \frac{\partial r_{ij}}{\partial y_i} + \right. \\ &\quad \left. \vec{e}_z \frac{\partial r_{ij}}{\partial z_i} \right) \frac{d\varphi(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}{dr_{ij}} = -\sum_{(i \neq j)} \left( \vec{e}_x \frac{x_{ij}}{r_{ij}} + \vec{e}_y \frac{y_{ij}}{r_{ij}} + \vec{e}_z \frac{z_{ij}}{r_{ij}} \right) \frac{d\varphi(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}{dr_{ij}} = \\ &= -\sum_{(i \neq j)} \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{r_{ij}} \frac{d\varphi(\vec{r}_i - \vec{r}_j)}{dr_{ij}} = \sum_{(i \neq j)} f_{ij} \end{aligned} \quad (4)$$

В случае, когда система состоит из множества потенциалов расчет силы становится затруднительным. Так как при любом изменении полной потенциальной энергии, происходит смещении атома  $i$ , что дает вклад в силу, действующую на этот атом.

Потенциалы Леннарда-Джонса и Морзе имеют огромную область действия [29]. Все используемые в моделировании потенциалы обрезаются на некотором расстоянии  $r_c$ , то есть взаимодействием атомов, находящихся на расстоянии  $r > r_c$ , пренебрегают.

$$U(r_{ij}) = \begin{cases} U(r_{ij}) - U(r_c) \\ 0 \end{cases}, r_{ij} < r_c, \quad r_{ij} > r_c, \quad (5)$$

Система (5) делает непрерывный потенциал, но проблема заключается в разрыве сил. Поэтому, потенциал делают таким образом, чтобы он гладко обращался в нуль со всеми его производными.

### 2.3. Программное обеспечение LAMMPS

LAMMPS (разработана в Сандийских национальных лабораторий) – это классический код молекулярной динамики (МД), который моделирует ансамбли частиц в жидком, твердом или газообразном состояниях [31]. Данный пакет может моделировать атомные, полимерные, биологические, твердотельные (металлы, керамика, оксиды), гранулированные, крупнозернистые или макроскопические системы, используя различные межатомные потенциалы (силовые поля) и граничные условия. Также есть возможность моделировать 2D или 3D системы с несколькими частицами до миллионов или миллиардов. В самом общем смысле LAMMPS объединяет уравнения движения Ньютона для совокупности взаимодействующих частиц. Отдельная частица может быть атомом, молекулой или электроном, крупнозернистым кластером атомов или мезоскопическим или макроскопическим скоплением материала. Модели взаимодействия, которые включает в себя LAMMPS, в основном носят кратковременный характер; некоторые дальнобойные модели также включены. LAMMPS использует списки соседей для отслеживания соседних частиц. Списки оптимизированы для систем с частицами, которые отталкивают на коротких расстояниях, так что локальная плотность частиц никогда не становится слишком большой. Это в отличие от методов, используемых для моделирования плазменных или гравитационных тел.

Программа для LAMMPS содержит 5 основных частей:

#### 1. Инициализация

*Units* – набор единиц измерения

*Dimension* – размерность пространства

*Boundary* – граничные условия

2. Определение структуры и типов атомов

*Lattice* – тип решетки

*Region* – задает область пространства

*Create\_box* – создает область

*Create\_box* – создает атомы

3. Задание потенциала взаимодействия

*Pair\_style* – тип потенциала

*Pair\_coeff* - коэффициенты

4. Установка условий для моделирования и вывода данных

*Fix* – тип процесса

*Thermo* – устанавливает параметры вывода в процессе

*Dump* – вывод данных в файл: числовые данные, изображения, видео

5. Запуск моделирования

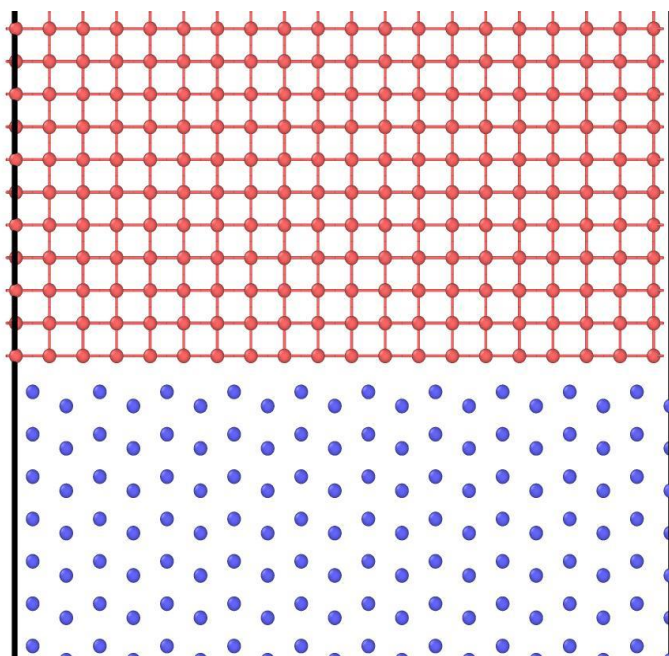
*Run* – основная команда для запуска моделирования

## Глава 3. Экспериментальная часть

Расчет проведен при помощи кода LAMMPS [31] для системы с Zr-Nb. Для описания взаимодействия между атомами использован многочастичный потенциал ADP [19], для описания взаимодействия  $H^+$  с Zr, Nb использован потенциал ZBL [34]. Для уменьшения трудоемкости расчета рассматривалась только одна кристалл Zr-Nb.

### 3.1. Генерация модели кристалла Zr-Nb

Генерация модели кристалла Zr-Nb. Решетка ниобия объемно-центрированная размещается в ориентации (1 1 0), а гексагональная решетка циркония размещается в ориентации (0 0 0 2). Несовпадение размеров решеток Zr и Nb составляет около 4 %. После объединения решеток производится процедура релаксации. Результаты объединения решеток приведены на рисунке 12.



Рисунке 12 - Результат релаксации кристалла Zr-Nb.

Алгоритм работы скрипта состоит из следующих этапов

1. Загрузка данных о положении атомов кристалла
2. Генерация начальной координаты протона и его вектора импульса по заданной энергии и области над кристаллом
3. Расчет прохождения протона через кристалл
4. Расчет релаксация системы до комнатной температуры

### 3.2. Результаты расчетов имплантации протонами в кристалл Zr-Nb

Протон запускался с начальной энергией  $E_0=1, 100, 200$  кэВ. Начальный угол генерировался случайно в диапазоне от  $0$  до  $1^\circ$  к нормали к поверхности Nb. Отслеживались траектории протонов, смещения атомов в кристалле. В результате моделирования были получены каскады столкновений. На рисунке 13 показана траектория прохождения протоном с начальной энергией  $100$  эВ кристалла Zr-Nb.

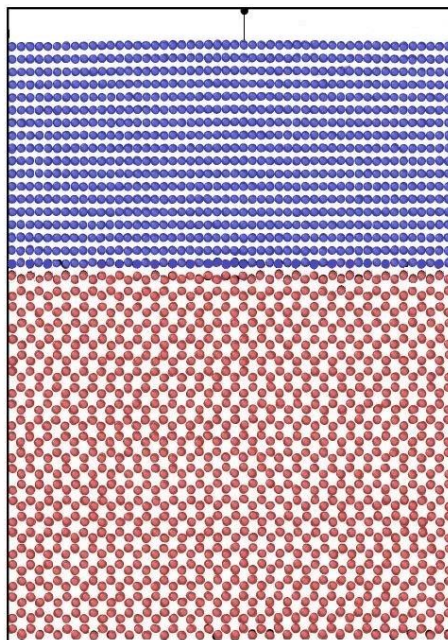


Рисунок 13 - Траектория протона с начальной энергией  $100$  эВ в системе Zr-Nb.

В результате пролета протона через кристалл образуется от двух до четырех атомов отдачи (междоузлий) за пролет (рисунок 14).

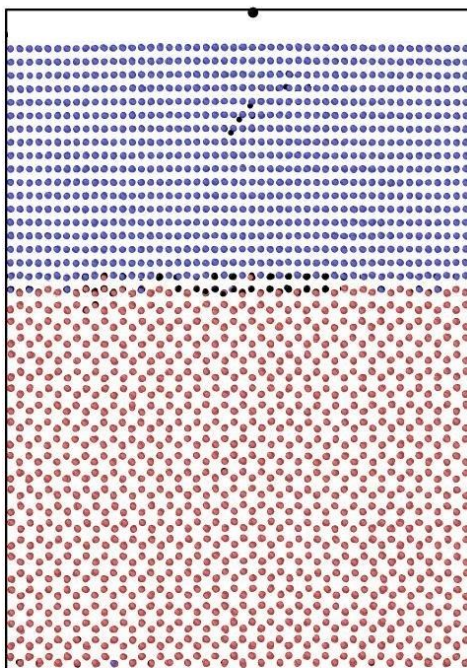


Рисунок 14 - Междоузельные атомы Nb и вакансии, образованные ими.

В процессе ионной имплантации не происходит существенного нагрева кристалла. Максимальный рост температуры 10 °C за пролет (рисунок 15).

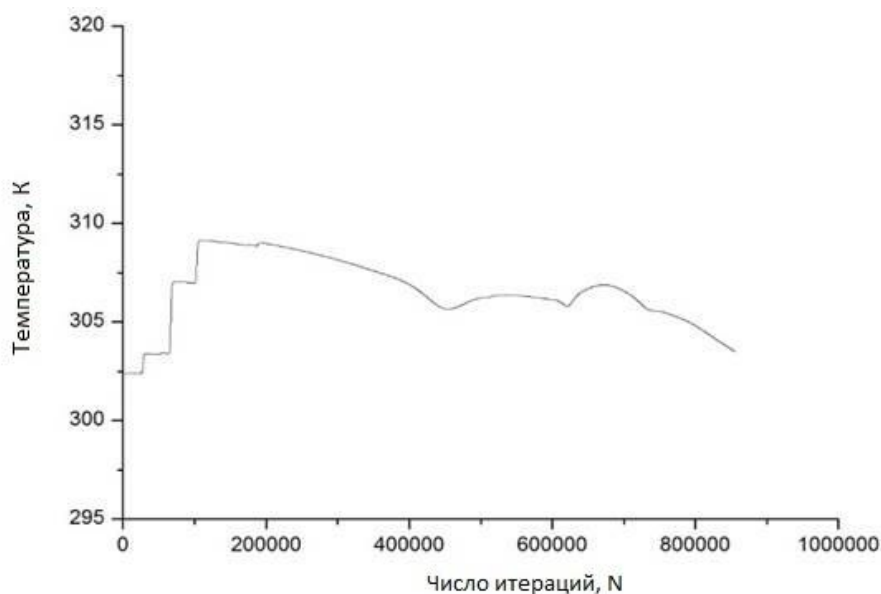


Рисунок 15 - Изменение температуры со временем расчета



Однако и под воздействием комнатной температуры возможна миграция дефектов в слое интерфейса Zr-Nb. Особенным слоем служит интерфейс кристалла Zr-Nb, на котором из-за механических напряжений происходит аннигиляция вакансий и междоузельных атомов.

### 3.3. Расчет каскадов смещений

Аналогично проводится расчет каскадов смещений для определения миграции дефектов по границе раздела. На первом этапе к модели добавляются вакансии и междоузлия путем случайного смещения атомов решетки, расположенных вблизи интерфейса (в пределах 1.4 нм в каждом из кристаллов) из положений равновесия. Затем происходит геометрическая минимизация системы и ее релаксация при комнатной температуре. При помощи процедуры минимизации энергии (метод сопряженных градиентов) и последующего отжига при комнатной температуре проводится расчет конфигурации междоузельных атомов и вакансий. На рисунке 16 показано пространственное распределение междоузельных атомов (выделены черным цветом) вблизи интерфейса Zr-Nb.

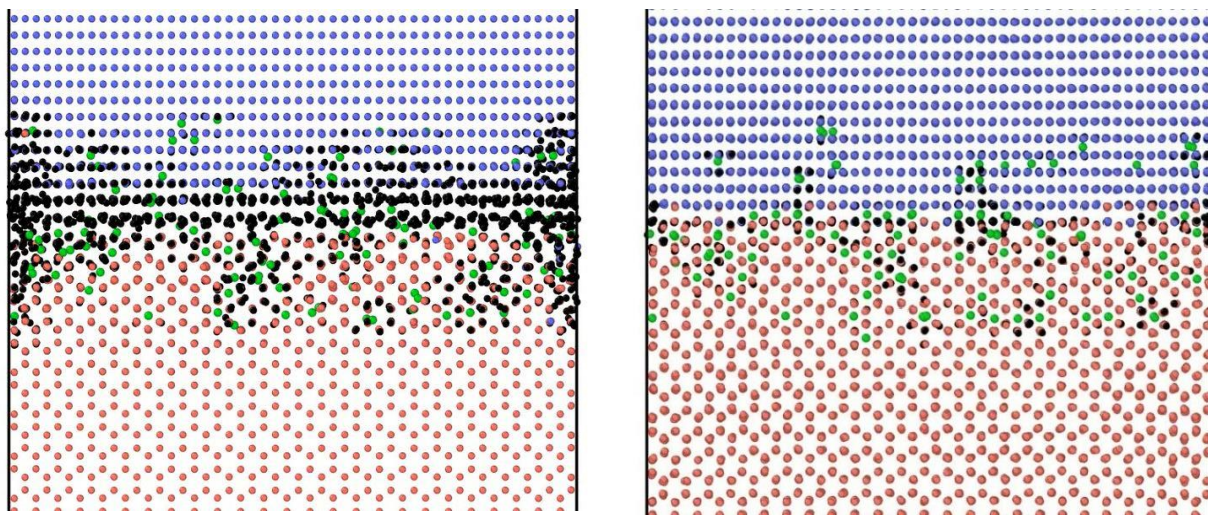


Рисунок 16 - Сравнение начальной конфигурации (слева) распределения дефектов (междоузлий – черные шарики) вдоль интерфейса Zr-Nb с конечной конфигурацией распределения междоузельных атомов (справа) после отжига при комнатной температуре.

Зависимость числа междоузлий от времени отжига показана на графике (рисунок 17).

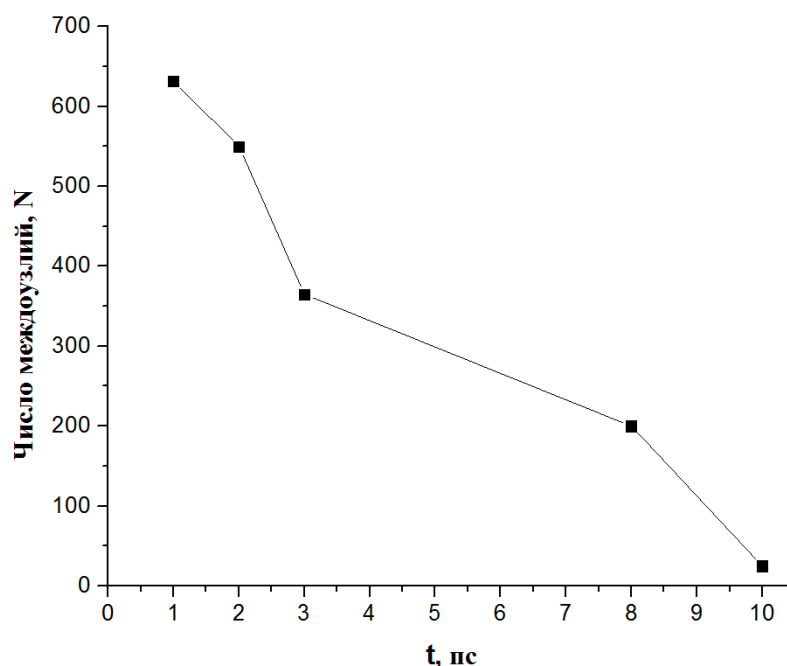


Рисунок 17 - Зависимость числа междоузельных атомов вблизи интерфейса Zr-Nb от времени отжига.

В соответствии с графиком число междоузлий уменьшается со временем, что согласуется с результатами экспериментов по измерению проводимости [33]. Уменьшение дефектов происходит на интерфейсе Zr-Nb из-за механических напряжений.

## **Глава 4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение**

### **4.1 Составление перечня работ**

Трудоемкость выполнения ВКР оценивается экспертным путем в человеко-днях и носит вероятностный характер, т.к. зависит от множества трудно учитываемых факторов.

Разделим выполнение дипломной работы на этапы, представленные в таблице 1:

Таблица. 1 *Перечень работ и продолжительность их выполнения*

| <b>Этапы работы</b>                                    | <b>Исполнители</b> | <b>Загрузка исполнителей</b> |
|--|--------------------|------------------------------|
| 1. Разработка задания на НИР                           | НР                 | НР – 100%                    |
| 2. Постановка целей и задач, получение исходных данных | НР, И              | НР – 100%<br>И – 50%         |
| 3. Составление и утверждение ТЗ                        | НР, И              | НР – 100%<br>И – 10%         |
| 4. Подбор и изучение материалов по тематике            | НР, И              | НР – 30%<br>И – 100%         |
| 5. Разработка календарного плана                       | НР, И              | НР – 100%<br>И – 10%         |
| 6. Разработка моделей для исследования                 | НР, И              | НР – 50%<br>И – 100%         |
| 7. Поиск методов решения                               | И                  | И – 100%                     |
| 8. Обобщение и оценка результатов                      | И                  | И – 100%                     |
| 9. Оформление отчета по НИР                            | И                  | И – 100%                     |
| 10. Оформление расчетно-пояснительной записки          | И                  | И – 100%                     |
| 11. Подведение итогов                                  | НР, И              | НР – 60%<br>И – 100%         |

#### **4.1.1 Продолжительность этапов работ**

Расчет трудоемкости осуществляется опытно-статистическим методом, основанным на определении ожидаемого времени выполнения работ в человека-днях по формуле (6):

$$t_{ож} = \frac{3t_{min} + 2t_{max}}{5} \quad (6)$$

где  $t_{min}$  – минимальная продолжительность работы, дн.;  $t_{max}$  – максимальная продолжительность работы, дн.;

Рассчитаем значение ожидаемой трудоемкости работы:

Работа 1:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot t_{min} + 2 \cdot t_{max}}{5} = \frac{3 \cdot 5 + 2 \cdot 10}{5} = 7 \text{ дн.}$$

Работа 2:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot t_{min} + 2 \cdot t_{max}}{5} = \frac{3 \cdot 12 + 2 \cdot 18}{5} = 14,4 \text{ дн.}$$

Работа 3:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot t_{min} + 2 \cdot t_{max}}{5} = \frac{3 \cdot 4 + 2 \cdot 7}{5} = 5,2 \text{ дн.}$$

Работа 4:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot t_{min} + 2 \cdot t_{max}}{5} = \frac{3 \cdot 3 + 2 \cdot 9}{5} = 5,4 \text{ дн.}$$

Работа 5:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot t_{min} + 2 \cdot t_{max}}{5} = \frac{3 \cdot 7 + 2 \cdot 18}{5} = 11,4 \text{ дн.}$$

Работа 6:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot t_{\min} + 2 \cdot t_{\max}}{5} = \frac{3 \cdot 11 + 2 \cdot 15}{5} = 12,6 \text{ дн.}$$

Работа 7:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot t_{\min} + 2 \cdot t_{\max}}{5} = \frac{3 \cdot 3 + 2 \cdot 6}{5} = 4,2 \text{ дн.}$$

Работа 8:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot t_{\min} + 2 \cdot t_{\max}}{5} = \frac{3 \cdot 8 + 2 \cdot 22}{5} = 13,6 \text{ дн.}$$

Работа 9:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot t_{\min} + 2 \cdot t_{\max}}{5} = \frac{3 \cdot 13 + 2 \cdot 18}{5} = 15 \text{ дн.}$$

Работа 10:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot t_{\min} + 2 \cdot t_{\max}}{5} = \frac{3 \cdot 6 + 2 \cdot 9}{5} = 7,2 \text{ дн.}$$

Работа 11:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot t_{\min} + 2 \cdot t_{\max}}{5} = \frac{3 \cdot 4 + 2 \cdot 10}{5} = 6,4 \text{ дн.}$$

Для установления продолжительности этапов в рабочих днях используем формулу (7):

$$T_{РД} = \frac{t_{ож}}{K_{ВН}} \cdot K_{Д} \quad (7)$$

где  $t_{ож}$  – продолжительность работы, дн.;

$K_{\text{вн}}$  – коэффициент выполнения работ, учитывающий влияние внешних факторов на соблюдение предварительно определенных длительностей, в частности, возможно  $K_{\text{вн}} = 1$ ;

$K_{\text{д}}$  – коэффициент, учитывающий дополнительное время на компенсацию непредвиденных задержек и согласование работ ( $K_{\text{д}} = 1\text{--}1,2$ ; в этих границах конкретное значение принимает сам исполнитель).

Расчет продолжительности этапа в календарных днях ведется по формуле (8):

$$T_{\text{КД}} = T_{\text{РД}} \cdot T_{\text{К}} \quad (8)$$

где  $T_{\text{КД}}$  – продолжительность выполнения этапа в календарных днях;

$T_{\text{К}}$  – коэффициент календарности, позволяющий перейти от длительности работ в рабочих днях к их аналогам в календарных днях, и рассчитываемый по формуле (9):

$$T_{\text{К}} = \frac{T_{\text{КАЛ}}}{T_{\text{КАЛ}} - T_{\text{ВД}} - T_{\text{ПД}}} \quad (9)$$

где  $T_{\text{КАЛ}}$  – календарные дни ( $T_{\text{КАЛ}} = 365$ );  $T_{\text{ВД}}$  – выходные дни ( $T_{\text{ВД}} = 52$ );  $T_{\text{ПД}}$  – праздничные дни ( $T_{\text{ПД}} = 10$ ).

$$T_{\text{К}} = \frac{365}{365 - 52 - 10} = 1,205$$

Рассчитаем продолжительность этапа в календарных днях. Результаты расчетов приведены в таблице 2.

Таблица 1 *Трудозатраты на выполнение проекта*

| Этап         | Исполнители | Продолжительность работ, дни |            |              | Трудоемкость работ по исполнителям чел.- дн. |              |             |              |
|--------------|-------------|------------------------------|------------|--------------|--|--------------|-------------|--------------|
|              |             |                              |            |              | $T_{РД}$                                     |              | $T_{КД}$    |              |
|              |             | $t_{min}$                    | $t_{max}$  | $t_{ож}$     | НР   | И            | НР          | И            |
| 1            | НР          | 5                            | 10         | 7            | 7,7  | -            | 9,27        | -            |
| 2            | НР, И       | 12                           | 18         | 14,4         | 15,84  | 7,92         | 19,1        | 9,54         |
| 3.           | НР, И       | 4                            | 7          | 5,2          | 5,72   | 0,57         | 6,89        | 0,68         |
| 4.           | НР, И       | 3                            | 9          | 5,4          | 1,782  | 5,94         | 2,14        | 6,5          |
| 5.           | НР, И       | 7                            | 18         | 11,4         | 12,54  | 1,25         | 15,11       | 1,5          |
| 6.           | НР, И       | 11                           | 15         | 12,6         | 6,93   | 13,86        | 8,35        | 16,7         |
| 7.           | И           | 3                            | 6          | 4,2          | -  | 4,62         | -           | 5,56         |
| 8.           | И           | 8                            | 22         | 13,6         | -  | 14,96        | -           | 18,02        |
| 9.           | И           | 13                           | 18         | 15           | -  | 16,5         | -           | 19,88        |
| 10.          | И           | 6                            | 9          | 7,2          | -  | 9,92         | -           | 9,54         |
| 11.          | НР, И       | 4                            | 10         | 6,4          | 4,22   | 7,04         | 5,1         | 8,5          |
| <b>Итого</b> |             | <b>76</b>                    | <b>142</b> | <b>102,6</b> | <b>54,73</b>                                 | <b>80,58</b> | <b>66,1</b> | <b>96,42</b> |

Наиболее удобным и наглядным видом календарного плана работ является построение ленточного графика проведения НИР в форме диаграмм Ганта (таблица 3).

Диаграмма Ганта – горизонтальный ленточный график, на котором работы по теме представляются протяженными во времени отрезками, характеризующимися датами начала и окончания выполнения данных работ [35].

График строится в рамках таблицы 2 с разбивкой по месяцам и неделям за период времени дипломирования. При этом работы на графике выделяются различной штриховкой в зависимости от исполнителей ответственных за ту или иную работу.

Таблица 3 *Линейный график работ*

| Этап | НР   | И    | Март |    |    | Апрель |    |    | Май |    |    | Июнь |     |
|------|------|------|------|----|----|--------|----|----|-----|----|----|------|-----|
|      |      |      | 10   | 20 | 30 | 40     | 50 | 60 | 70  | 80 | 90 | 100  | 110 |
| 1    | 9,2  | -    | ■    |    |    |        |    |    |     |    |    |      |     |
| 2    | 19,1 | 9,54 | ■    | ■  |    |        |    |    |     |    |    |      |     |
| 3    | 6,89 | 0,68 |      | ■  | ■  | ■      |    |    |     |    |    |      |     |
| 4    | 2,14 | 6,5  |      |    |    | ■      | ■  |    |     |    |    |      |     |
| 5    | 15,1 | 1,5  |      |    |    |        | ■  | ■  |     |    |    |      |     |
| 6    | 8,35 | 16,7 |      |    |    |        | ■  | ■  | ■   |    |    |      |     |
| 7    | -    | 5,56 |      |    |    |        |    | ■  | ■   | ■  |    |      |     |
| 8    | -    | 18,1 |      |    |    |        |    |    | ■   | ■  | ■  |      |     |
| 9    | -    | 19,8 |      |    |    |        |    |    |     | ■  | ■  | ■    |     |
| 10   | -    | 9,54 |      |    |    |        |    |    |     |    |    | ■    | ■   |
| 11   | 5,1  | 8,5  |      |    |    |        |    |    |     |    |    |      | ■   |

НР – ■; И ■



## 4.2 Расчет сметы затрат на выполнение проекта

Таблица 4 *Расчет затрат на материалы*

| Наименование материалов        | Цена заед.,руб. | Кол-во    | Сумма, руб. |
|--------------------------------|-----------------|-----------|-------------|
| Бумага для принтера формата А4 | 2               | 100листов | 200         |
| Картридж для принтера          | 1500            | 1шт.      | 1500        |
| Интернет                       | 350             | 1 М/бит   | 350         |
| Ручка                          | 55              | 2шт.      | 110         |
| Тетрадь                        | 70              | 2шт.      | 140         |
| Итого:                         |                 |           | 2300        |

Допустим, что ТЗР составляют 5 % от отпускной цены материалов, тогда расходы на материалы с учетом ТЗР равны  $C_{\text{мат}} = 2300 * 1,05 = 2415$  руб.

### 4.2.1 Расчет заработной платы

Среднедневная тарифная заработная плата ( $ЗП_{\text{дн-т}}$ ) рассчитывается по формуле (9):

$$ЗП_{\text{дн-т}} = МО/25,083 \quad (9)$$

учитывая, что в году 301 рабочий день и, следовательно, в месяце в среднем 25,083 рабочих дня (при шестидневной рабочей неделе)<sup>1</sup>.

Расчет затрат на полную заработную плату приведен в таблице 5. Затраты времени по каждому исполнителю в рабочих днях с округлением до

---

целого взяты из таблицы 2. Для учета в ее составе премий, дополнительной зарплаты и районной надбавки используется следующий ряд коэффициентов:  $K_{ПР} = 1,1$ ;  $K_{доп.ЗП} = 1,188$ ;  $K_p = 1,3$ . Таким образом, для перехода от тарифной (базовой) суммы заработка исполнителя, связанной с участием в проекте, к соответствующему полному заработку (зарплатной части сметы) необходимо первую умножить на интегральный коэффициент  $K_{и} = 1,1 * 1,188 * 1,3 = 1,699$ . Вышеуказанное значение  $K_{доп.ЗП}$  применяется при шестидневной рабочей неделе, при пятидневной оно равно 1,113, соответственно в этом случае  $K_{и} = 1,62$ .

Таблица 0 Затраты на заработную плату

| Исполнитель | Оклад, руб./мес | Среднедневная ставка, руб./раб. день | Затраты времени, раб. дни | Коэффициент | Фондз/платы, руб. |
|-------------|-----------------|--------------------------------------|---------------------------|-------------|-------------------|
| НР          | 33664           | 1342,09                              | 55                        | 1,699       | 125411,6          |
| И           | 15 470          | 616,75                               | 81                        | 1,62        | 80928,5           |
| Итого:      |                 |                                      |                           |             | 206340,1          |

#### 4.2.2 Расчет затрат на социальный налог

Затраты на единый социальный налог (ЕСН), включающий в себя отчисления в пенсионный фонд, на социальное и медицинское страхование, составляют 30 % от полной заработной платы по проекту, т.е.  $C_{соц.} = C_{ЗП} * 0,3$ . Итак, в нашем случае  $C_{соц.} = 206340,1 * 0,3 = 61902,3$  руб.

#### 4.2.3 Расчет затрат на электроэнергию

Данный вид расходов включает в себя затраты на электроэнергию, потраченную в ходе выполнения проекта на работу используемого оборудования, рассчитываемые по формуле (10):

$$C_{\text{эл.об.}} = P_{\text{об}} \cdot t_{\text{об}} \cdot \text{Ц}_{\text{э}} \quad (10)$$

где  $P_{\text{об}}$  – мощность, потребляемая оборудованием, кВт;

$\text{Ц}_{\text{э}}$  – тариф на 1 кВт·час;

$t_{\text{об}}$  – время работы оборудования, час.

Для ТПУ  $\text{Ц}_{\text{э}} = 5,748$  руб./кВт·час (с НДС).

Время работы оборудования вычисляется на основе итоговых данных таблицы 2 для инженера ( $T_{\text{рд}}$ ) из расчета, что продолжительность рабочего дня равна 8 часов.

$$t_{\text{об}} = T_{\text{рд}} \cdot K_t, \quad (11)$$

где  $K_t \leq 1$  – коэффициент использования оборудования по времени, равный отношению времени его работы в процессе выполнения проекта к  $T_{\text{рд}}$ , определяется исполнителем самостоятельно. В ряде случаев возможно определение  $t_{\text{об}}$  путем прямого учета, особенно при ограниченном использовании соответствующего оборудования.

Мощность, потребляемая оборудованием, определяется по формуле (12):

$$P_{\text{об}} = P_{\text{ном.}} \cdot K_c \quad (12)$$

где  $P_{\text{ном.}}$  – номинальная мощность оборудования, кВт;

$K_c \leq 1$  – коэффициент загрузки, зависящий от средней степени использования номинальной мощности. Для технологического оборудования малой мощности  $K_c = 1$ .

Расчет затрат на электроэнергию для технологических целей приведен в таблице 6.

Таблица 6 *Затраты на электроэнергию технологическую*

| Наименование оборудования | Время работы оборудования<br>$t_{\text{ОБ}}$ , час | Потребляемая мощность $P_{\text{ОБ}}$ , кВт | Затраты $\mathcal{E}_{\text{ОБ}}$ , руб. |
|---------------------------|--|---|--|
| Персональный компьютер    | 80,58·8·0,7  | 0,3   | 135,37                                   |
| Струйный принтер          | 1,5  | 0,1   | 0,15                                     |
| Итого:                    |  |   | 135,52                                   |

### 4.3 Расчет амортизационных расходов

В статье «Амортизационные отчисления» рассчитывается амортизация используемого оборудования за время выполнения проекта.

Используется формула (13):

$$C_{\text{АМ}} = \frac{H_{\text{А}} + \mathcal{C}_{\text{ОБ}} + t_{\text{рф}} + n}{F_{\text{д}}} \quad (13)$$

где  $H_{\text{А}}$  – годовая норма амортизации единицы оборудования;

$\mathcal{C}_{\text{ОБ}}$  – балансовая стоимость единицы оборудования с учетом ТЗР. При невозможности получить соответствующие данные из бухгалтерии она может быть заменена действующей ценой, содержащейся в ценниках, прейскурантах и т.п.;

$F_{\text{д}}$  – действительный годовой фонд времени работы соответствующего оборудования, берется из специальных справочников или фактического режима его использования в текущем календарном году. При этом второй вариант позволяет получить более объективную оценку  $C_{\text{АМ}}$ . Например, для ПК в 2015

г. (298 рабочих дней при шестидневной рабочей неделе) можно принять  $F_d = 298 \cdot 8 = 2384$  часа;

$t_{pf}$  – фактическое время работы оборудования в ходе выполнения проекта, учитывается исполнителем проекта;  $n$  – число задействованных однотипных единиц оборудования.

Постановление правительства РФ «О классификации основных средств, включенных в амортизационные группы» позволяет получить рамочные значения сроков амортизации (полезного использования) оборудования  $\equiv SA$  [36]. Например, для ПК это  $2 \div 3$  года. Необходимо задать конкретное значение  $SA$  из указанного интервала, например, 2,5 года. Далее определяется  $N_A$  как величина обратная  $SA$ , в данном случае это  $1 : 2,5 = 0,4$ .

Стоимость ПК 45000 руб, время использования 590 часов, тогда для него  $C_{AM}(ПК) = (0,4 \cdot 45000 \cdot 451,25 \cdot 1) / 2408 = 3373,97$  руб. Стоимость принтера 10000 руб., его  $F_d = 500$  час.;  $N_A = 0,5$ ;  $t_{pf} = 1$  час., тогда его  $C_{AM}(Пр) = (0,5 \cdot 10000 \cdot 1,5 \cdot 1) / 500 = 15$  руб. Итого начислено амортизации 3388,13 руб.

#### ***4.3.1 Расчет прочих расходов***

В статье «Прочие расходы» отражены расходы на выполнение проекта, которые не учтены в предыдущих статьях, их принимают равными 10% от суммы всех предыдущих расходов, т.е.

$$C_{\text{проч.}} = (C_{\text{мат}} + C_{\text{зп}} + C_{\text{соц}} + C_{\text{эл.об.}} + C_{\text{ам}}) \cdot 0,1$$

$$C_{\text{проч.}} = (2415 + 206340,1 + 61902,3 + 135,52 + 3388,13) \cdot 0,1 = 27418,4 \text{руб.}$$

#### ***4.3.2 Расчет общей себестоимости разработки***

Проведя расчет по всем статьям сметы затрат на разработку, можно определить общую себестоимость проекта «Макет демонстрационной модели принципов КТ».

Таблица 7 *Смета затрат на разработку проект*

| Статья затрат                 | Условное обозначение | Сумма, руб. |
|-------------------------------|----------------------|-------------|
| Материалы и покупные изделия  | $C_{\text{мат}}$     | 2415        |
| Основная заработная плата     | $C_{\text{зп}}$      | 206340,1    |
| Отчисления в социальные фонды | $C_{\text{соц}}$     | 61902,3     |
| Расходы на электроэнергию     | $C_{\text{эл.}}$     | 135,52      |
| Амортизационные отчисления    | $C_{\text{ам}}$      | 3388,13     |
| Прочие расходы                | $C_{\text{проч}}$    | 27418,4     |
| <b>Итого:</b>                 |                      | 301599,45   |

Таким образом, затраты на разработку составили  $C = 301599,45$ руб.

#### **4.3.3 Расчет прибыли**

Если исполнитель работы не располагает данными для применения «сложных» методов, то прибыль принимают в размере  $5 \div 20$  % от полной себестоимости проекта. В нашем случае прибыль составляет 60319,8 руб. (20 %) от расходов на разработку проекта.

#### ***4.3.4 Расчет НДС***

НДС составляет 20% от суммы затрат на разработку и прибыли. В нашем случае это  $(301599,45 + 60319,8) * 0,2 = 72383,52$  руб.

#### ***4.3.5 Цена разработки НИР***

Цена равна сумме полной себестоимости, прибыли и НДС, в нашем случае

$$C_{\text{НИР(КР)}} = 301599,45 + 60319,8 + 72383,2 = 426127,12 \text{ руб.}$$

#### **4.4 Оценка экономической эффективности проекта**

Оценка экономической эффективности применительно к данной работе невозможна, так как она носит исключительно теоретический характер.

## Глава 5. Социальная ответственность

Безопасность работника в условиях любого современного предприятия обеспечивается правовой, социально-экономической, организационно-технической, санитарно-гигиенической, лечебно-профилактической защитой. Защита человека – основа охраны труда. Организационные мероприятия по охране труда должны быть основаны на административных, и правоохранительных мерах по предотвращению воздействия на человека вредных и опасных факторов производственной среды. При любых производственных условиях на рабочем месте всегда может существовать разные опасные и вредные факторы. На человека, работа которого связана с моделированием на компьютере, воздействуют следующие вредные факторы: некомфортные метеоусловия, производственный шум, электромагнитное поле низкой частоты, недостаточная освещённость.

Работа проводилась в школе общей физики в физико-техническом институте томского политехнического университета. Для выполнения квалификационной работы на тему «Миграция точечных дефектов в многослойной структуре Zr-Nb при ионной имплантации» проводилась подготовка рабочего стола, настройка компьютера и установка всех необходимых программ. Основная работа заключается в моделирование физических процессов, происходящих в композитном материале Zr-Nb. Следовательно, для разработки комплекса мероприятий технического, организационного, режимного и правового характера, минимизирующих негативные последствия проектируемой деятельности, особое внимание было уделено безопасности и гигиене труда при работе с компьютером.



## **5.1.Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности**

### **5.1.1. Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.**

В соответствии с трудовым законодательством продолжительность рабочего времени не превышало 40 часов в неделю, что означает продолжительность работы за один день составляла чуть больше бти часов. На основании статьи 108 ТК РФ исполнителям проекта был представлен перерыв для отдыха и питания. Время на перерыв выбиралось исполнителями самостоятельно, однако его диапазон был регламентирован от 30 минут до 2 часов. Время перерыва в рабочее время не включается [37].

Большую часть времени работа выполнялась сидя. Конструкция рабочего места и взаимное расположение всех элементов соответствовала антропометрическим, физиологическим и психологическим требованиям, а также характеру работы. Таким образом, обеспечивалось оптимальное положение работника в соответствии с ТК РФ ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ [38].

Основная работа производилась с помощью персонального компьютера. Так как компьютер представляет собой совокупность приборов: процессор, экран (дисплей), клавиатура и компьютерная мышь. На протяжении всей работы выполнялись требования, регламентированные ГОСТ Р 50923-96 [39].

В соответствии с Федеральным законом "О санитарно-эпидемиологическом благополучии населения" от 30 марта 1999 года N 52-ФЗ в процессе эксплуатации ПК соблюдались санитарные правила, оговорённые в [40,41].

## 5.2. Производственная безопасность.

Моделирование «Миграции точечных дефектов в многослойной структуре Zr-Nb при ионной имплантации» проводилось в аудитории 401 на кафедре общей физики ТПУ. Выявленные опасные и вредные факторы при выполнении работ на ПК приведены в таблице 8.

Таблица 8 – Возможные опасные и вредные факторы

| Факторы<br>(ГОСТ 12.0.003-2015)                 | Этапы работ |              |              | Нормативные документы   |
|---|-------------|--------------|--------------|---|
|   | Разработка  | Изготовление | Эксплуатация |   |
| 1.Отклонение показателей микроклимата           | +           | +            | +            | СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений[42]                             |
| 2.Превышение уровня шума                        | +           | +            | +            | СН2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых,общественных зданий и на территории жилой застройки[43] |
| 3.Отсутствие или недостаток естественного света | -           | +            | -            | СНиП 23-05-95"Естественное и искусственное освещение[46]  |
| 4.Недостаточная освещенность рабочей зоны       | +           | -            | -            | СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному                     |

|  |   |   |   |   |
|--|---|---|---|---|
|  |   |   |   | освещению жилых и общественных зданий[47].  |
| 6.Повышенное значение напряжения в электрической цепи, замыкание которой может произойти через тело человека | - | - | - | ГОСТ 12.1.038-82. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов[48]. |

### 5.3. Анализ вредных факторов производственной среды

#### 5.3.1. Микроклимат

Микроклиматом производственных помещений — называют метеорологические условия внутри помещений. Эти условия определяются действующим на организм человека рядом факторов. В этот ряд входят температура воздуха, влажность, скорость движения воздуха и тепловое излучение. Так же на микроклимат влияет набор физических факторов, оказывающих влияние на состояние человека. Это теплообмен человека с окружающей средой и факторы, определяющие самочувствие. Такие факторы как работоспособность, здоровье и производительность труда.

В производственных помещениях, в которых работа с использованием ПЭВМ является основной (диспетчерские, операторские, расчетные, кабины и посты управления, залы вычислительной техники и др.) и связана с нервно-эмоциональным напряжением, должны обеспечиваться оптимальные параметры микроклимата для категории работ 1а по затрачиваемой работниками энергии (физические энергозатраты меньше 139 Вт).

Санитарными нормами микроклимата производственных помещений СанПин 2.2.4.548-96 установлены оптимальные и допустимые нормы температуры, относительной влажности и скорости движения воздуха с учетом тяжести выполняемой работы и периодов года [41].

Таблица 9 – *Оптимальные показатели микроклимата на рабочих местах производственных помещений.*

| Период года | Температура воздуха, °С | Относительная влажность воздуха, φ% | Скорость движения воздуха, м/с |
|-------------|-------------------------|-------------------------------------|--------------------------------|
| Холодный    | 22-24                   | 40-60                               | 0,1                            |
| Теплый      | 23-25                   |                                     | 0,1                            |

К мероприятиям по оздоровлению воздушной среды в производственном помещении относятся: правильная организация вентиляции и кондиционирования воздуха, отопление помещений. Вентиляция может осуществляться естественным и механическим путём. Система отопления должна обеспечивать достаточное, постоянное и равномерное нагревание воздуха. В помещениях с повышенными требованиями к чистоте воздуха должно использоваться водяное отопление. Параметры микроклимата в используемой лаборатории регулируются системой центрального отопления, и имеют следующие значения: влажность – 40%, скорость движения воздуха – 0,1 м/с, температура летом – от 20 до 25°С, зимой – от 13 до 15°С. В лаборатории осуществляется естественная вентиляция. Воздух поступает и удаляется через щели, окна, двери.

### **5.3.2. Производственный шум**

Шум – колебания, как правило, беспорядочные, разнообразной физической природы. Такие колебания, отличающиеся сложностью спектральной и временной структуры. Длительное воздействие шумовых колебаний на человека может привести к ослаблению слуха, а в некоторых случаях – к полной его потере. Установлено, что загрязнение шумовыми колебаниями среды, на рабочем месте, негативно влияет на людей. Как следствие, у работающих, понижается внимание, увеличиваются затраты энергии при идентичной физической нагрузке, тормозятся психические реакции и т.п. Как итог - понижается производительность труда, страдает качество выполняемой работы.

Соответственно санитарным нормам СН 2.2.4/2.1.8.562-96, предельно допустимые уровни звукового давления, уровни звука и эквивалентные уровни звука для программистов вычислительных машин в лабораториях для теоретических работ и обработки данных представлены в таблице 10.

Таблица 10 – *Допустимые уровни звукового давления*

|  |                   |     |    |     |     |     |      |      |      |      |
|--|-------------------|-----|----|-----|-----|-----|------|------|------|------|
| Уровни звукового давления, дБ, в октавных полосах со среднегеометрическими частотами | Полоса частот, Гц | 1,5 | 3  | 125 | 250 | 500 | 1000 | 2000 | 4000 | 8000 |
|  | Уровни звука, дБ  | 86  | 71 | 61  | 54  | 49  | 45   | 42   | 40   | 38   |
| Уровни звука и эквивалентные уровни звука (дБА)                                      | 50                |     |    |     |     |     |      |      |      |      |

При выполнении работы на ПЭВМ уровень шума на рабочем месте находится в норме (меньше 50 дБА), так как в помещении источником звуков является только компьютер, который не нарушает слух человека [43].

При значениях выше допустимого уровня необходимо предусмотреть средства коллективной (СКЗ) и индивидуальной защиты (СИЗ). К СКЗ относятся: устранение причин шума или существенное его ослабление в

источнике образования; изоляция источников шума от окружающей среды средствами звуко- и виброизоляции, звуко- и вибропоглощения; применение средств, снижающих шум и вибрацию на пути их распространения. К СИЗ – применение спецодежды, спецобуви и защитных средств органов слуха: противошумные наушники, беруши, антифоны.

### 5.3.3. Электромагнитные поля

Электромагнитное поле – это силовое поле, образованное вокруг электрического тока, эквивалентное электрическому полю и магнитному полю, расположенным под прямыми углами друг к другу. Источниками электромагнитного излучения являются приборы, работающие от электрического тока. Например, линии электропередач компьютеры, телефоны, и т.д. Помещение, в котором располагается научно-исследовательское оборудование, оснащено персональными компьютерами. Исходя из этого основным источником электромагнитного излучения, в помещении лаборатории, является компьютер. В таблице 11 представлены частоты излучения ПК.

Таблица 11 – *Частоты излучения ПК*

| Источник   | Диапазон   |
|--|------------|
| Монитор: Сетевой трансформатор блока питания                         | 50 Гц      |
| Статистический преобразователь напряжения в импульсном блоке питания | 20-100 кГц |

|   |                       |
|---|-----------------------|
| Блок кадровой развертки и синхронизации                             | 48-160 Гц             |
| Ускоряющее анодное напряжение монитора (только для мониторов с ЭЛТ) | 0 Гц (Электростатика) |
| Системный блок  | 50 Гц-1000 МГц        |
| Устройства ввода/вывода информации                                  | 0 Гц, 50 Гц           |
| Источники бесперебойного питания                                    | 50 Гц, 20 -100 кГц    |

В России система стандартов по электромагнитной безопасности складывается из ГОСТ [43, 44] и СанПиН. Максимально допустимые параметры плотности потока энергии электромагнитного поля составляют – 25 мкВт/см<sup>2</sup> в течение 8 часов, 100 мкВт/см<sup>2</sup> максимальное значение не превышает 1000 мкВт/см<sup>2</sup>.

Длительное воздействие электромагнитного излучения на организм человека ведёт к нарушениям процессов в центральной нервной системе, сбоям в работе сердечно-сосудистой системы. Возможно появление катаракты хрусталика глаза, ломкости ногтей и выпадения волос. Первыми симптомами воздействия электромагнитных полей являются быстрая утомляемость, слабость, головные боли, понижение частоты пульса и повышение температуры тела.

#### **5.3.4. Освещенность**

Уровень освещенности, на рабочем месте, должен соответствовать условиям работы и быть оптимальным по яркости. Световой спектр должен максимально соответствовать дневному освещению, так как оно оптимально соответствует человеческой физиологии. Очень высокий уровень освещенности, так же, как и недостаточный, приводит к быстрому утомлению зрения. Освещение должно быть равномерным на всей площади рабочего места, так как при переносе взгляда с более освещенных на менее освещенные участки рабочего места и наоборот происходит понижение остроты зрения на достаточно долгий промежуток времени. Требования к уровню освещенности в производственных помещениях утверждены сводом правил [46]. Для производственных помещений всех назначений применяются системы общего (равномерного или локализованного) и комбинированного (общего и местного) освещения. Выбор между равномерным и локализованным освещением проводится с учётом особенностей производственного процесса и размещения технологического оборудования. Система комбинированного освещения применяется для производственных помещений, в которых выполняются точные зрительные работы. Применение одного местного освещения на рабочих местах не допускается.

Источники света, применяемые для искусственного освещения, делят на две группы – газоразрядные лампы и лампы накаливания. Для общего освещения, как правило, применяются газоразрядные лампы как энергетически более экономичные и обладающие большим сроком службы. Наиболее распространёнными являются люминесцентные лампы. По спектральному составу видимого света различают лампы дневной (ЛД), холодно-белой (ЛХБ), тепло-белой (ЛТБ) и белой цветности (ЛБ). Наиболее широко применяются лампы типа ЛБ. При повышенных требованиях к передаче цветов освещением применяются лампы типа ЛХБ, ЛД. Лампа типа ЛТБ применяется для правильной цветопередачи человеческого лица. В данном случае используется лампа ЛХБ [47].



При выборе типа светильников следует учитывать светотехнические требования, экономические показатели, условия среды. Наиболее распространёнными типами светильников для люминесцентных ламп являются: Открытые двухламповые светильники типа ОД, ОДОР, ШОД, ОДО, ООД – для нормальных помещений с хорошим отражением потолка и стен, допускаются при умеренной влажности и запылённости. Наилучшими вариантами равномерного размещения светильников являются шахматное размещение и по сторонам квадрата (расстояния между светильниками в ряду и между рядами светильников равны). При равномерном размещении люминесцентных светильников последние располагаются обычно рядами – параллельно рядам оборудования. При высоких уровнях нормированной освещённости люминесцентные светильники обычно располагаются непрерывными рядами, для чего светильники сочленяются друг с другом торцами.

#### **5.4. Анализ опасных факторов производственной среды**

##### **5.4.1. Электробезопасность**

Электробезопасность представляет собой систему организационных и технических мероприятий и средств, обеспечивающих защиту людей от вредного и опасного воздействия электрического тока.

Воздействие электрического напряжения на человека связано с протеканием через него тока. Действие электрического тока на человека носит сложный и разнообразный характер. При замыкании электрической цепи через организм человека ток оказывает термическое, электролитическое, биологическое и механическое воздействие. Прохождение тока может вызывать у человека раздражение и повреждение различных органов. По ГОСТ 12.019.-2009 установлены предельно допустимые уровни напряжений

прикосновения и токов, протекающих через тело человека при взаимодействии их с переменным током частотой 50 Гц, соответственно 2В и 0,3 мА.

Для характеристики воздействия переменного тока частотой 50 Гц на человека установлены три степени его воздействия и пороговые значения.

Таблица 12 – *Пороговые значения токов*

| Значение<br>порового тока | ощутимый        | неотпускающий | фибрилляционный |
|---------------------------|-----------------|---------------|-----------------|
| Переменные, 50<br>Гц      | 0,5 мА – 1,5 мА | 10 мА – 15 мА | 100 мА -5 А     |

Электроустановки классифицируют по напряжению: с номинальным напряжением до 1000 В (помещение без повышенной опасности), до 1000 В с присутствием агрессивной среды (помещение с повышенной опасностью) и свыше 1000 В (особо опасное помещение). Лаборатория относится к помещениям без повышенной опасности поражения электрическим током, в которых отсутствуют условия, создающие повышенную или особую опасность [48].

Для предотвращения поражения электрическим током следует проводить следующие мероприятия:

- содержать оборудование в работоспособном состоянии и эксплуатировать его в соответствии с нормативно-техническими документами;
- своевременно проводить техническое обслуживание;
- соблюдать технику безопасности при работе с оборудованием;
- проводить инструктаж для работников

В помещении применяются следующие меры защиты от поражения электрическим током: недоступность токоведущих частей для случайного прикосновения, все токоведущие части изолированы и ограждены. Недоступность токоведущих частей достигается путем их надежной изоляции, применения защитных ограждений, расположения токоведущих частей на недоступной высоте. К СКЗ относятся заземление и разделение электрической сети с помощью трансформаторов – в результате изолированные участки сети обладают большим сопротивлением изоляции и малой емкостью проводов относительно земли, за счет чего значительно улучшаются условия безопасности. В качестве индивидуальных средств защиты от поражения электрическим током применяют диэлектрические перчатки, боты и галоши, ковры, изолирующие подставки и переносные заземления.

### **5.5. Охрана окружающей среды**

Охрана природы и рациональное использование природных ресурсов – одна из важнейших экономических и социальных задач. При выполнении выпускной квалификационной работы с использованием компьютера, возможно возникать отходы бумаги. Бумаги используются для записи результатов моделирования. Для охраны окружающей среды от загрязнения и истощения, можно использовать бумагу повторно и перерабатывать отходы методом повторного изготовления.

### **5.6. Безопасность в чрезвычайных ситуациях**

Производство находится в городе Томске типичными чрезвычайными ситуациями на объекте, в данном случае, могут быть сильные морозы, которые характерны для Сибири. Достижение критически низких температур может привести к авариям систем теплоснабжения и жизнеобеспечения, приостановке

работы или обморожениям. В случае переморозки труб должны быть предусмотрены запасные обогреватели, обеспечена устойчивость теплоснабжения за счет запасных автономных источников теплоснабжения, кольцевания системы, заглубления теплотрасс. Их количества и мощности должно хватать для того, чтобы работа на производстве не прекратилась.

#### **5.6.1. Факторы пожарной и взрывной природы**

Согласно НПБ 105-03 по взрывопожарной и пожарной опасности помещения подразделяются на категории А, Б, В, Г и Д. В данном случае, работа проводилась в компьютерном классе, в котором горючие вещества и материалы находятся в твердом состоянии, поэтому помещение относится к категории В. Возникновение пожара при работе с электронной аппаратурой может быть по причинам электрического характера, в том числе: короткое замыкание, перегрузки по току, статическое электричество и т. д.

Для устранения причин возникновения и локализации пожаров в помещении лаборатории должны проводиться следующие мероприятия:

- использование только исправного оборудования;
- проведение периодических инструктажей по пожарной безопасности;
- отключение электрооборудования, освещения и электропитания при предполагаемом отсутствии обслуживающего персонала или по окончании работ;
- содержание путей и проходов для эвакуации людей в свободном состоянии.

Для локализации или ликвидации загорания на начальной стадии используются первичные средства пожаротушения. Первичные средства пожаротушения обычно применяют до прибытия пожарной команды.

Первичные средства пожаротушения включают в себя пожарные рукава, пожарный кран, переносные и передвижные огнетушители. В зависимости от применяемого огнетушащего вещества огнетушители разделяются: водные, пенные, газовые, порошковые и комбинированные:

- Огнетушитель воздушно-пенный передвижной ОВП предназначен для тушения загораний и начинающихся пожаров, различных веществ и материалов, за исключением щелочных металлов, веществ, горение которых происходит без доступа воздуха, электроустановок, находящихся под напряжением.

- Углекислотные огнетушители применяются для тушения возгораний различных веществ и материалов и заряжены сжиженным углекислотным газом. Углекислота не проводит ток, поэтому углекислотные огнетушители можно применять для тушения пожаров в электроустановках, находящихся под напряжением не более 10000В, с расстояния не менее одного метра.

- Порошковые огнетушители предназначены для тушения горящих твердых веществ и электроустановок под напряжением до 1000 В. Кроме того, порошковые применяют для тушения документов.

Огнетушители следует располагать на видных местах вблизи от выходов из помещений. Размещение первичных средств пожаротушения в коридорах, переходах не должно препятствовать безопасной эвакуации людей. Здание должно соответствовать требованиям пожарной безопасности, а именно, наличие охранно-пожарной сигнализации, плана эвакуации, порошковых или углекислотных огнетушителей с поверенным клеймом, табличек с указанием направления к выходу [49].

При возникновении возгорания необходимо немедленно прекратить работу, выйти из программы и отключить питание компьютера позвонить в подразделение пожарной охраны по телефону 01 или 010, сообщить о

случившемся руководителю подразделения и приступить к тушению огня первичными средствами пожаротушения [50,51].

На рисунок 18 представлен план эвакуации из лабораторий, находящихся в аудитории 401 четвертого этажа третьего корпуса ТПУ.



Рисунок 18 - План эвакуации из лабораторий

## Вывод

В данной работе рассмотрены безопасность и гигиена труда при осуществлении моделирования миграции дефектов многослойной структуре Zr-Nb при ионной имплантации. Были выявлены вредные и опасные факторы рабочей зоны, причины и средства защиты, рассмотрены чрезвычайные ситуации и поведение в них. Социальная ответственность представляет диалектическую взаимосвязь между лицом (работодателем) и обществом (работником), характеризующаяся взаимными правами и обязанностями по выполнению социальных норм и наложению воздействия в случае ее нарушения.

## Заключение

В ходе проделанной работы образец наноразмерного многослойного металлического Zr/Nb покрытия был подвергнут облучению протонами. Приведена зависимость изменения числа междоузлий и изменения температуры от времени релаксации. В результате имплантации протонов низких энергий ( $\sim$  кэВ) в кристалле Zr-Nb образуются каскады смещений, что при их распространении увеличивает число вакансий вблизи интерфейса Zr-Nb. Междоузельные атомы и вакансии, образованные в результате каскадов смещений из-за механических напряжений в кристалле Zr-Nb мигрируют к границе Zr-Nb, а затем аннигилируют. Уменьшение числа междоузельных атомов согласуется с экспериментальными данными по измерению проводимости имплантированных водородом образцов.

## Список литературы

1. Watkins G. D. EPR observation of close Frenkel pairs in irradiated ZnSe //Physical Review Letters. – 1974. – Т. 33. – №. 4. – С. 223.
2. Matsukawa Y., Zinkle S. J. One-dimensional fast migration of vacancy clusters in metals //Science. – 2007. – Т. 318. – №. 5852. – С. 959-962.
3. Victoria M. et al. The microstructure and associated tensile properties of irradiated fcc and bcc metals //Journal of nuclear materials. – 2000. – Т. 276. – №. 1-3. – С. 114-122.
4. Sickafus K. E. et al. Radiation-induced amorphization resistance and radiation tolerance in structurally related oxides //Nature materials. – 2007. – Т. 6. – №. 3. – С. 217.
5. Shen T. D. et al. Enhanced radiation tolerance in nanocrystalline Mg Ga<sub>2</sub>O<sub>4</sub> //Applied physics letters. – 2007. – Т. 90. – №. 26.
6. Bai X. M. et al. Efficient annealing of radiation damage near grain boundaries via interstitial emission //Science. – 2010. – Т. 327. – №. 5973. – С. 1631-1634.
7. Nita N., Schaeublin R., Victoria M. Impact of irradiation on the microstructure of nanocrystalline materials //Journal of Nuclear Materials. – 2004. – Т. 329. – С. 953-957.
8. Demkowicz M. J., Hoagland R. G., Hirth J. P. Interface structure and radiation damage resistance in Cu-Nb multilayer nanocomposites //Physical review letters. – 2008. – Т. 100. – №. 13. – С. 136102.
9. Callisti M., Karlik M., Polcar T. Competing mechanisms on the strength of ion-irradiated Zr/Nb nanoscale multilayers: Interface strength versus radiation hardening //ScriptaMaterialia. – 2018. – Т. 152. – С. 31-35.
10. Bai X. M. et al. Efficient annealing of radiation damage near grain boundaries via interstitial emission //Science. – 2010. – Т. 327. – №. 5973. – С. 1631-1634



11. Sen H. S., Polcar T. Vacancy-interface-helium interaction in Zr-Nb multi-layer system: A first-principles study //Journal of Nuclear Materials. – 2019. – T. 518. – C. 11-20.
12. Misra A. et al. The radiation damage tolerance of ultra-high strength nanolayered composites //Jom. – 2007. – T. 59. – №. 9. – C. 62-65.
13. Demkowicz M. J., Thilly L. Structure, shear resistance and interaction with point defects of interfaces in Cu–Nb nanocomposites synthesized by severe plastic deformation //Actamaterialia. – 2011. – T. 59. – №. 20. – C. 7744-7756
14. Chen Y. et al. In situ study of heavy ion irradiation response of immiscible Cu/Fe multilayers //Journal of nuclear materials. – 2016. – T. 475. – C. 274-279.
15. Callisti M., Karlik M., Polcar T. Competing mechanisms on the strength of ion-irradiated Zr/Nb nanoscale multilayers: Interface strength versus radiation hardening //ScriptaMaterialia. – 2018. – T. 152. – C. 31-35.
16. Callisti M., Lozano-Perez S., Polcar T. Structural and mechanical properties of  $\gamma$ -irradiated Zr/Nb multilayer nanocomposites //Materials Letters. – 2016. – T. 163. – C. 138-141.
17. Ham B., Zhang X. High strength Mg/Nbnanolayer composites //Materials Science and Engineering: A. – 2011. – T. 528. – №. 4-5. – C. 2028-2033.
18. Wang J., Misra A. An overview of interface-dominated deformation mechanisms in metallic multilayers //Current Opinion in Solid State and Materials Science. – 2011. – T. 15. – №. 1. – C. 20-28.
19. Smirnova D. E., Starikov S. V. An interatomic potential for simulation of Zr-Nb system //Computational Materials Science. – 2017. – T. 129. – C. 259-272.
20. Sutmann G. Classical molecular dynamics and parallel computing. – FZJ-ZAM, 2002.
21. Кроткевич Д. Г. Влияние облучения протонами на структуру наноразмерного металлического многослойного покрытия Zr/Nb. – 2018.

22. Roth J., Gahler F., Trebin H. R. A molecular dynamics run with 5 180 116 000 particles //International Journal of Modern Physics C. – 2000. – T. 11. – №. 2. – C. 317-322.
23. Alder B. J., Wainwright T. E. Studies in molecular dynamics. I. General method //The Journal of Chemical Physics. – 1959. – T. 31. – №. 2. – C. 459-466.
24. Y. Duan and P. A. Kollman. Pathways to a protein folding intermediate observed in a 1-microsecond simulation in aqueous solution. Science, 282:740, 1998.
25. D. Okunbor and R. D. Skeel. Explicit canonical methods for Hamiltonian systems. Math. Comput., 59:439–455, 1992
26. L. Verlet. Computer experiments on classical fluids. I. Thermodynamical properties of lennard-jones molecules. Phys. Rev., 159:98, 1967.
27. Delhommelle J., Millié P. Inadequacy of the Lorentz-Berthelot combining rules for accurate predictions of equilibrium properties by molecular simulation //Molecular Physics. – 2001. – T. 99. – №. 8. – C. 619-625.
28. J. A. Izaguirre, S. Reich, and R. D. Skeel. Longer time steps for molecular dynamics. J. Chem. Phys., 110:9853, 1999
29. D. Fincham. Optimization of the Ewald sum for large systems. Molec. Sim., 13:1–9, 1994
30. Экштайн В. Компьютерное моделирование взаимодействия частиц с поверхностью твердого тела. – 1995.
31. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // Journal of Computational Physics. -- 1995. -- 3/1/. -- T. 117, № 1. -- C. 1-19.
32. M. Callisti, M. Karlik, T. Polcar, Competing mechanisms on the strength of ionirradiatedZr/Nb nanoscale multilayers: interface strength versus radiation hardening, Scripta Mater. 152 (2018) 31e35.
33. The Stopping and Range of Ions in Matter. / Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U., 1985. -- 321 c.
34. The Stopping and Range of Ions in Matter. / Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U., 1985. -- 321 c.

35. Шульмин В. А. Экономическое обоснование в дипломных проектах: учебное пособие для вузов / В. А. Шульмин, Т. С. Усынина. – Старый Оскол: ТНТ, 2012. – 192 с.
36. Кнышова Е. Н. Экономика организации: учебник / Е. Н. Кнышова, Е. Е. Панфилова. – Москва: Форум Инфра-М, 2012. – 334 с.: ил. – Профессиональное образование.
37. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 1.04.2019).
38. ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.
39. ГОСТ Р 50923-96. Дисплеи. Рабочее место оператора. Общие эргономические требования и требования к производственной среде. Методы измерения.
40. ГОСТ Р 50923-96. Дисплеи. Рабочее место оператора. Общие эргономические требования и требования к производственной среде. Методы измерения.
41. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы.
42. ГОСТ 12.1.003-74 "ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация"
43. СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
44. СН 2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории жилой застройки.
45. СанПиН 2.2.4.1191—03. Электромагнитные поля в производственных условиях
46. ГОСТ 54 30013-83 Электромагнитные излучения СВЧ. Предельно допустимые уровни облучения. Требования безопасности

47. СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03. Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий.
48. СНиП 23-05-95 "Естественное и искусственное освещение"
49. ГОСТ Р 12.1.019-2009. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
50. ГОСТ 12.1.038-82. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Предельно допустимые значения напряжений прикосновения и токов
51. НПБ 105-03. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности
52. ГОСТ 12.1.004-91. Пожарная безопасность. Общие требования.
53. СНиП 21-01-97. Противопожарные нормы.
54. Lichter B. D. Precision lattice parameter determination of zirconium-oxygen solid solution //Trans. Met. Soc. AIME. – 1960. – Т. 218.
55. Benites G. M. et al. Structural properties of metastable phases in Zr–Nb alloys: I. Neutron diffraction study and analysis of lattice parameters //Journal of alloys and compounds. – 2000. – Т. 299. – №. 1-2. – С. 183-188.
56. Cook H. E. On first-order structural phase transitions—II. The omega transformation in Zr-Nb alloys //Acta Metallurgica. – 1975. – Т. 23. – №. 9. – С. 1041-1054.